ORSAY
n° d'ordre : 3345

UNIVERSITE DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

THESE

présentée

Pour obtenir

Le TITRE de DOCTEUR 3ème CYCLE

Spécialité : Physique des Solides

PAR

Robert BOTET

SUJET : LOIS D'ECHELLE AVEC LA TAILLE: CAS DES SYSTEMES A COORDINENCE INFINIE.

soutenue le 23 Novembre 1982 devant la Commission d'examen

MM. J. FRIEDEL Président

R. JULLIEN Rapporteur

V. ALESSANDRINI

S. DONIACH

P. PFEUTY

ORSAY
n° d'ordre : 3345

UNIVERSITE DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

THESE

présentée

Pour obtenir

Le TITRE de DOCTEUR 3ème CYCLE

Spécialité : Physique des Solides

PAR

Robert BOTET

SUJET : LOIS D'ECHELLE AVEC LA TAILLE: CAS DES SYSTEMES A COORDINENCE INFINIE.

soutenue le 23 Novembre 1982 devant la Commission d'examen

MM. J. FRIEDEL Président

R.JULLIEN Rapporteur

V.ALESSANDRINI

S.DONIACH

P.PFEUTY

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

ABSTRACT -

This thesis is a theoretical study of the finite size behavior of statistical systems in which each element interacts equally with all the others. For these "infinitely coordinated" systems, the mean-field approximation is valid when a second order phase transitions is developed in the thermodynamic limit. The scaling laws of Fisher and Barber are reexamined in order to be applied to those systems. An argument allows the derivation of characteristics exponents giving the size behavior of thermodynamical quantities, at the critical temperature. These exponents are related with the upper critical dimensionality of the corresponding short range system. Various tests of the argument are given by analytical and numerical calculations for various models with different upper critical dimensionalities.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41543515_0025

Je tiens à remercier ici quelques personnes sans l'aide de qui cette thèse ne serait pas.

En tout premier lieu, Monsieur le Professeur J. Friedel, qui m'a accueilli dans son laboratoire, et qui m'a très souvent redonné confiance en moi, par l'intérêt spontané pour mes premiers travaux de recherche. Je le remercie de plus, d'avoir accepté de présider à mon jury de thèse.

Je tiens à témoigner de toute ma reconnaissance envers Monsieur le Professeur A. Blandin, que j'ai souvent ennuyé de questions à la fin de ses cours sur les transitions de phase et qui m'a néanmoins fait connaître du groupe de P. Pfeuty et R. Jullien.

Monsieur le Professeur V. Alessandrini dont les cours de mécanique des fluides, d'une rare clarté, m'avaient profondément impressionné, a accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Monsieur le Professeur S. Doniach, de l'Université de Stanford, a accepté, malgré ses multiples activités, d'être membre de ce même jury.

D'autre part, j'ai travaillé directement avec Pierre Pfeuty, dont j'ai pu profiter des idées lumineuses et toujours originales, et surtout Rémi Jullien qui m'a guidé continuellement dans les méandres de la recherche et dont l'optimisme sans faille, et l'entrain constant, m'ont souvent été une aide inestimable.

J'ai toujours grandement apprécié les discussions avec Maximilian Kolb, dit Max, dont les idées, fines et astucieuses, sont trop souvent tues par une modestie excessive.

Je remercie Karol Penson qui, en particulier, nous a trouvé les références du modèle de Lipkin, et Duncan Haldane dont l'imagination débordante nous a beaucoup stimulés.

Jacqueline Noguès m'a souvent secouru lorsque je n'arrivais désespérément plus à me faire comprendre de l'ordinateur.

Je tiens à citer ici quelques amis dont les avis m'ont été utiles pour ce travail : Dominique Olivier pour ses points de vue personnels et hardis, Sylvie Leray pour ses connaissances de physique nucléaire, Christian Glattli pour son esprit ouvert et inventif, Laurence Maurines pour un service qu'elle seule pouvait me rendre.

Cette thèse a été tapée par Madame Kakou avec sa gentillesse accoutumée et une infinie patience pour mon écriture petite et serrée. Madame Touchant en a fait les figures et Monsieur Saint-Martin les a photographiées pour l'impression. Madame Dufour m'a promis de se charger du travail ingrat et fastidieux de l'édition.

Je remercie aussi à cette occasion Madame Coulle, qui a résolu, à la fin de mon service militaire, quelques tracasseries administratives.

Je remercie enfin mes parents, qui m'ont appris à regarder et à rêver et mon épouse Catherine Botet dont l'aide fut incalculable. Je ne citerai ici que sa correction de toutes les fautes de calcul que j'avais pu faire dans les Appendices.

PROLOGUE

Il ne faut jamais compter que sur soi-même,
et encore, pas beaucoup.

Tristan Bernard.

On m'avait demandé de mettre sur ordinateur le problème d'un petit amas de particules en interaction, et d'en étudier les propriétés à l'équilibre, avec l'idée de mieux comprendre les phénomènes de transition de phase. Curieuse étude, car tout le monde sait bien qu'il faut un nombre macroscopique d'atomes pour "faire" une transition de phase, alors que, souvent, on ne peut guère introduire plus d'une quinzaine de particules dans le problème.

Ce genre de point de vue oublie deux faits importants : tout d'abord, un phénomène collectif n'apparaît pas brutalement pour une assemblée de taille infinie mais il commence à perturber le système même pour des tailles faibles d'amas. Il ne s'agit pas alors de prouver mathématiquement quelque chose mais de prévoir le phénomène et de dissocier dans le problème ce qui est physiquement important de ce qui n'est qu'insignifiant. Dans ce sens-là, on peut parler de l'usage de l'ordinateur comme d'une "intuition automatisée" et le fait de voir un phénomène et de pouvoir le comprendre est certainement aussi important que d'en trouver une formulation mathématique, qui, pour des problèmes complexes, est souvent de nature si hermétique que l'on ne peut en tirer grand-chose sinon la satisfaction de l'avoir trouvée.

Le deuxième point de vue, tout à fait différent, consiste à croire que le traitement exact d'amas de taille intermédiaire entre le microscopique et le macroscopique constitue en lui-même l'étude d'un domaine de la physique méconnu et pourtant aussi riche que bien d'autres. Et si l'on ne s'intéresse pas aux agrégats de gaz rares, on peut penser étudier la structure des noyaux atomiques ou si l'on trouve ce sujet trop petit, on peut parler des amas ouverts d'étoiles, et, si l'on trouve ces objets trop grands, il y a bien d'autres domaines où l'étude des systèmes à n corps, où $1 < n << \infty$, seront intéressants. Pour ces systèmes, l'ordinateur apparaît comme un outil tout à fait indispensable en ce sens que, théoriquement, il évite la résolution de calculs analytiques fastidieux, et concrètement, il représente une expérience pure où l'on est sûr qu'il n'y aura ni fuite, ni impureté, et pour laquelle, les conditions physiques, y compris la forme de l'interaction ou la symétrie de l'échantillon, peuvent être très facilement changées.

Pour cette thèse, on m'a conseillé de ne développer qu'un de nos travaux, qui a le mérite de former un tout, en ce sens que nous avons réalisé la généralisation d'un phénomène et sa vérification. Je me suis alors attaché à exposer uniquement ce que nous avons fait sans insister sur les travaux antérieurs.

INTRODUCTION

Newtonien/Attenant à la philosophie de l'Univers fondée par Newton, qui découvrit qu'une pomme tombait au sol, sans pouvoir dire pourquoi. Ses successeurs et disciples ont progressé au point de pouvoir dire quand.

Ambrose Bierce.

Les équations de la physique peuvent généralement être rangées en deux grandes catégories : les équations phénoménologiques qui décrivent globalement les phénomènes à l'échelle macroscopique et qui sont directement dérivées de l'expérience, et les équations locales qui décrivent les interactions au niveau microscopique et qui sont posées comme modèle mathématique. On dit alors que l'on a compris quelque chose à un phénomène lorsqu'on a réussi à retrouver ses équations globales à partir des équations locales.

L'idée pour effectuer ce passage est de relier les grandeurs physiquesmicroscopiques à leurs moyennes sur un grand nombre (infini) de particules. Cette transformation est parfois facile à faire, par exemple lorsqu'il n'y a pas de corrélation de ces grandeurs d'une particule à l'autre, car la moyenne sera alors une fonction simple (intensive ou extensive) de la taille du système. Mais malheureusement, tout n'est pas toujours aussi simple et les changements de phase, dont nous allons parler maintenant, qui sont, en physique, conséquences de phénomènes collectifs, échappent par cela même à cette facilité.

Une manière d'obtenir des renseignements sur ces phénomènes, lorsque le calcul analytique semble infaisable, est de considérer des systèmes de taille intermédiaire entre la taille microscopique et la taille macroscopique, les premières manifestations (quoique non singulières) de la transition de phase pour un système infini, apparaissant pour des tailles relativement faibles de ce même système.

L'exemple de prédilection, en physique de l'état solide, de changement de phase est la transition du deuxième ordre, en température, entre un état ferromagnétique (phase basse température) et un état paramagnétique (phase haute température) de certaines substances telles que le Fer, le Nickel, etc... (Curie (1895)). Un modèle simplifié (microscopique) consiste en un solide de moments magnétiques de grandeur donnée en interaction ferromagnétique, ces moments étant tous parallèles à un axe privilégié du solide et n'ayant pour seule liberté que de choisir leur sens (vers le haut : $\uparrow$ ou vers le bas : $\downarrow$).

Ising (1925) résolut le problème à 1 dimension d'espace (pour lequel il trouva d'ailleurs qu'il n'existait pas de transition à température finie, car la faible coordinence du réseau (un site n'interagit ici qu'avec ses deux plus proches voisins) entraîne que la formation d'un "mur" (...↑↑↑↓↓↓...) donc la destruction de l'ordre à grande distance, demande moins d'énergie que le retournement d'un spin (...↑↑↑↓↑↑↑...)). En 1944, Onsager résolut le même problème mais à 2 dimensions (sur réseau carré), en considérant un système infini dans une dimension et fini dans l'autre, avec conditions aux limites périodiques. Cette méthode tout à fait originale pour passer d'un réseau à 1 dimension à un réseau à 2 dimensions a entraîné une recherche de sa généralisation en vue de trouver la solution à 3 dimensions (expérimentalement, la plus intéressante, et curieusement la seule analytiquement inconnue, puisque l'on connaît aussi les solutions pour les dimensions d'espace supérieures ou égales à 4).

C'est Fisher, qui, 25 ans plus tard, allait étudier systématiquement deux méthodes apparemment différentes pour étendre cette méthode, mais qui convergeront plus tard vers la méthode des tailles finies.

La première extension a été de considérer un réseau fini dans les deux directions, et pour lequel le rapport des tailles (dans les directions respectives) est une constante. Le nombre de configurations possibles d'un tel système est fini (si N est le nombre total de particules, il y a 2^N configurations possibles) et donc la fonction de partition est une fonction analytique de la température et du champ magnétique extérieur puisque somme finie de fonctions analytiques ($e^{-\beta E}$) de ces mêmes variables. Les fonctions thermodynamiques qui en dérivent (susceptibilité magnétique, aimantation, chaleur spécifique,...) sont donc, elles aussi analytiques et il n'y a pas de transition de phase possible. Néanmoins, si, pour un système infini, une fonction thermodynamique diverge à une température critique, cette même fonction pour un système fini développera à une température appelée quasi-critique (en général différente de la précédente et dépendante de la taille du système) un maximum dont la hauteur divergera avec la taille.

Kaufman (1949) calcula la fonction de partition en champ nul, du modèle d'Ising à 2 dimensions pour des tailles finies avec conditions aux limites périodiques, mais c'est Ferdinand et Fisher (Ferdinand (1967) ; Ferdinand and Fisher (1969)) qui étudieront le comportement effectif de

fonctions thermodynamiques avec la taille du système, à température fixée. Par exemple, pour la chaleur spécifique, ils trouvent un comportement tout à fait différent au voisinage de la température de transition et loin de cette température. Plus précisément, pour un système de taille n dans les 2 directions, la convergence de la chaleur spécifique par site : $C_{n,n}(T)$, tend vers sa valeur limite $C_{\infty,\infty}(T)$, exponentiellement en n, sauf dans un voisinage de l'ordre de 1/n de la température critique, où $C_{n,n}(T)$ se comporte comme $A_o \text{Log } n$, où A_o est la même constante que celle apparaissant dans la solution limite : $C_{\infty,\infty}(T) \sim - A_o \text{ Log } | T - T_c |$, lorsque T est voisin de sa valeur critique. Ce phénomène fait apparaître dans un cas particulier une relation entre le comportement d'une grandeur thermodynamique avec la taille pour un système fini, à la température quasi-critique, et le comportement de cette même grandeur, avec la température, pour une taille infinie.

Par la suite Fisher et Barber (1972) s'intéressèrent au comportement asymptotique d'un système qui est infini dans d - 1 dimensions et fini, de taille n, dans la dimension restante, avec des conditions aux limites diverses (libres, périodiques, antipériodiques). Dans ce genre de système, contrairement à ceux qui sont de tailles finies, on peut définir une température critique (qui dépendra tout de même de l'épaisseur n) et une longueur de corrélation qui diverge à la transition avec un exposant caractéristique ν_d. Pour une fonction thermodynamique quelconque Y, les auteurs posent alors explicitement une loi d'échelle avec la taille n de la forme :

$$Y(n, T) \sim n^{\psi/\nu} \; X\left(\frac{n}{\xi}\right) \qquad \text{lorsque } n \to \infty \quad \text{et } T \to T_c$$

où ψ est l'exposant caractéristique de la fonction Y à la transition, c'est à dire

$$Y(\infty, T) \sim A \; |T - T_c|^{-\psi} \qquad \text{lorsque } T \to T_c$$

et où X est une fonction régulière de son argument ; on connaît a priori les comportements asymptotiques lorsque celui-ci est proche de 0 ou de ∞, (plus précisément, on doit avoir $X(x) \sim Ax^{-\psi/\nu}$ quand $x \to \infty$, et $X(x) \sim Bx^{-\mathring{\psi}/\nu}$ quand $x \to 0$, où $\mathring{\psi}$ est l'exposant caractéristique de divergence de la fonction Y pour un système à d-1 dimensions). Ils vérifient de plus ce genre de relation sur le modèle sphérique de dimensionnalité quelconque, le modèle d'Ising à 2 dimensions, des calculs expérimentaux d'exposants

critiques pour des films d'Hélium, etc... Cette théorie met en évidence le rôle fondamental joué par la longueur de corrélation du système puisque la seule connaissance de son comportement critique dans un système à d dimensions permet de passer des exposants critiques du système à d-1 dimensions aux exposants critiques du système à d-dimensions.

La synthèse de ces deux méthodes a été réellement faite et exploitée par Nightingale (1976) qui introduisit une technique du groupe de renormalisation à un cristal fini dans toutes les directions et qui définit la longueur de corrélation pour le système fini, et surtout par Hamer et Barber (1980), qui posèrent systématiquement des lois d'échelle avec la taille pour un réseau fini à bords libres et les utilisèrent explicitement pour en tirer le comportement critique de systèmes de taille infinie. La pratique de cette méthode en est théoriquement très simple et permet à moindres frais de "débroussailler" un grand nombre de problèmes (en ce sens que ses résultats suggèrent la solution sans toutefois la prouver).

De manière concrète, il s'agit de résoudre numériquement (c'est à dire en général, sur ordinateur) un système donné pour des tailles finies de plus en plus grandes jusqu'à obtenir le comportement asymptotique des grandeurs thermodynamiques intéressantes avec la taille. Pour donner des ordres de grandeur, une quantité physique A se comporte typiquement comme : $A \sim A_o\, n^{\alpha}\, (1 + O(\frac{1}{n}))$ et donc sur un diagramme Log A en fonction de Log n la déviation par rapport à l'asymptote est d'ordre 1/n. Pour arriver à une précision de l'ordre de quelques pour cent, il faudrait arriver à résoudre des tailles de l'ordre de 100 sites dans chaque direction, ce qui n'est que très rarement le cas. En fait, pour des systèmes de chaînes (donc 1-dimension) magnétiques de spins, on arrive à résoudre jusqu'à des tailles de l'ordre de 16 à 18 sites pour des spins 1/2 (donc précision de 5 à 10 % sur les exposants de lois d'échelle) et 12 à 14 sites pour des spins 1, malgré des méthodes de résolution numérique très puissantes (Whitehead and Watt (1978) ; Whitehead (1980)). On voit sur ces données qu'il ne faut pas négliger a priori de chercher analytiquement des précisions sur la forme des lois d'échelle, en particulier à la température critique (il est fréquent par exemple que, en ce point, le gap entre l'état fondamental et le premier état excité suive une loi d'échelle en n^{-1} (Jullien and Pfeuty (1981)), ou que l'on connaisse la forme des fonctions de corrélation

(Haldane (1981)), de manière à réduire les incertitudes dues à la limitation des calculs numériques.

Lorsque j'ai commencé à travailler pour cette thèse, le petit groupe constitué par Pfeuty, Jullien et Kolb utilisait intensivement la méthode des tailles finies pour l'étude de systèmes se ramenant à des chaînes magnétiques. Le travail qui m'avait été donné consistait alors en deux voies de recherche autour de cette méthode : en collaboration avec F. D. M. Haldane (University of Southern California, Los Angeles), entreprendre une étude systématique des chaînes de spins 1 et vérifier les différences que prévoit sa théorie (Haldane (1982)) par rapport aux chaînes correspondantes de spins 1/2. Ce travail est toujours en cours et a déjà donné des résultats particulièrement intéressants (Botet and Jullien (1982 c)), je ne fais que le mentionner ici et il ne fait pas partie du sujet de ma thèse. Le second travail comportait l'adaptation des méthodes de tailles finies à des systèmes avec interactions à longue portée. En effet, cette méthode n'avait été développée que pour des systèmes de particules en interactions proches voisins . Dans le cas contraire, on s'attend à ce que la convergence vers le comportement asymptotique soit plus lente à cause de l'amplification des effets de bord mais l'on ne sait pas si ces comportements changent ou non par rapport aux interactions à courtes portées. Le premier Hamiltonien étudié était du type Heisenberg, de spins 1/2, avec interactions en $\frac{1}{r^p}$ où r est la distance relative entre deux spins et p est un paramètre variable de 0 à + ∞, représentant la plus ou moins longue portée de l'interaction, de plus la température du système était supposée nulle. Les résultats (Botet and Jullien (1982 a)) nous parurent suffisamment encourageants pour s'attaquer à un problème plus riche : le modèle d'Ising en champ magnétique transverse et interactions à longue portée en $\frac{1}{r^p}$. En effet le modèle permet de suivre une transition en champ en fonction de p et de voir plus finement à partir de quel paramètre critique p_c la physique du système est du type champ moyen. En fait, nous nous sommes rendus compte très vite que le cas p = 0 comportait une anomalie de lois d'échelle à la transition en champ (à T = 0) qui était toutefois suffisamment simple pour être caractéristique d'un phénomène facilement explicable. En effet, alors que, de part et d'autre de la transition, l'aimantation, par exemple,

suit une loi d'échelle tout à fait normale du type $M^2 - M_\infty^2 = O(\frac{1}{n})$, à la transition, on obtient avec une précision indubitable (nous avons pu résoudre pour ce système, des tailles de l'ordre de 150 sites) une loi du type $M \sim n^{-1/3}$ dont l'exposant caractéristique $-\frac{1}{3}$ ne sortait de manière évidente ni de la méthode des tailles finies, ni d'un calcul analytique direct.

Les systèmes où p = 0, que nous avons appelés par la suite systèmes à coordinence infinie, (car l'interaction se faisant indépendamment de la distance entre les spins, pour un système infini, on peut dire que chaque site est proche voisin d'une infinité de (en fait, de tous les autres) sites), sont des systèmes régis par une physique du type champ moyen et les lois d'échelle ne sont pas vérifiées sous leur forme originale dans ce cas-là (Barber and Fisher (1973), Brézin (1982)). D'autre part, nous avons retrouvé un article de Kittel et Shore (1965) traitant du modèle Heisenberg à coordinence infinie, étudié en température, où les auteurs mettaient bien en évidence analytiquement une loi d'échelle du type $M \sim n^{-1/4}$, à la température de transition, et posaient le problème de la signification physique d'un si faible exposant de convergence avec la taille. Nous avons alors développé un argument, basé sur le fait que les lois d'échelle devraient être non pas basées sur le rapport $\frac{L}{\xi}$ où L est la dimension linéaire du système et ξ la longueur de corrélation mais sur le rapport $\frac{N}{N_c}$ de la taille (nombre total de sites) du système sur un nombre de corrélation qui diverge à la transition et dont la signification physique est à peu près similaire à ξ^d où d est la dimensionnalité du système. Ceci a permis une remise au point des lois d'échelle avec la taille, et de relier les exposants - 1/3 et - 1/4 trouvés précédemment aux dimensionnalités critiques supérieures des systèmes avec interactions courtes portées correspondants (d_c = 3 et 4 respectivement).

Ce sont cet argument et les vérifications de ses conséquences que je vais développer à présent.

TABLE DES CHAPITRES

pages

⁂ Lois de Fisher et Barber 1

On introduit les lois d'échelle avec la taille, d'un système thermodynamique. Près d'une transition de phase, sa longueur de corrélation ξ, est la seule longueur caractéristique et L/ξ est le paramètre sans dimension qui détermine son comportement. Cette approche de la transition n'est valable que pour $d < d_c$.
On vérifie sur des exemples connus, que l'on peut définir une taille de corrélation N_c qui diverge à la transition et que le rapport N/N_c semble plus fondamental que le précédent en ce sens que les lois d'échelle sont vérifiées pour toute dimensionnalité de système.

⁂ Les systèmes à coordinence infinie 8

On donne la définition d'un système Co ∞ comme d'un système fini de particules qui interagissent toutes, deux à deux, identiquement. Cela pose le problème de la nature physique d'un tel système puisqu'il n'existe plus ni longueur, ni dimensionnalité caractéristiques.
On introduit la forme générale d'un Hamiltonien Co ∞.

⁂ Un exemple : le modèle de Berlin et Kac Co ∞ 11

Il s'agit d'un modèle qui peut être entièrement traité analytiquement. On trouve un comportement champ moyen pour un ensemble infini de particules, mais pour un ensemble fini, il y a une anomalie de convergence vers la limite thermodynamique lorsque la température est égale à la température critique. On donne, de plus, explicitement les lois d'échelle avec la taille du système.

pages

:: Extension des lois de Fisher et Barber 18

Deux hypothèses sont énoncées permettant d'introduire des lois d'échelle même dans les cas où la physique du système est champ moyen.

H 1 : qui reprend les lois de Fisher et Barber mais où la variable fondamentale est maintenant N/N_c, où N_c désigne une taille caractéristique dont le sens physique est explicité.

H 2 : qui correspond à un argument permettant, pour des systèmes champ moyen, de relier le comportement critique de N_c à celui de ξ pour le système avec interactions proches voisins correspondant et à la dimensionnalité critique supérieure.

L'ensemble de ces deux hypothèses permet de retrouver les résultats mis en évidence dans le cas de Berlin et Kac Co ∞

:: Principe des vérifications analytiques 26

Lorsque le système Co ∞ possède une densité d'énergie libre du type Landau, on peut vérifier automatiquement les hypothèses H 1 et H 2, et le calcul explicite de l'exposant critique de N_c est possible directement.

De plus, le cas où le système possède des interactions à longues portées (du type $\frac{1}{r^p}$) et une physique du type champ moyen, est discuté.

:: L'Hamiltonien d'Ising Co ∞ de spins 1/2 et les modèles quantiques qui s'y rattachent..... 35

. Le modèle d'Ising Co ∞..... 35

Il s'agit du système résolu par Kittel et Shore en 1965, et qui montre le même genre d'anomalie à la température critique que celui de Berlin et Kac.

Le fait que l'on trouve une densité d'énergie libre du type Landau permet de vérifier les hypothèses H 1 et H 2 et donc d'expliquer ces comportements

pages

. L'Hamiltonien d'Heisenberg Co ∞ 39

Il possède à la limite thermodynamique, la même densité d'énergie libre que le modèle précédent, ce qui explique le même comportement.

. Le modèle d'Ising Co ∞ avec champ conjugué aléatoire. 39

L'écart-type de la loi de probabilité du champ magnétique aléatoire intervient maintenant comme nouveau paramètre. Le calcul de la densité d'énergie libre est possible analytiquement, d'où l'on déduit les lois d'échelle près de la transition. La dimensionnalité critique supérieure du modèle avec interactions proches voisins est discutée.

:: Exemples numériques 43

Dans de nombreux cas, le calcul analytique de la fonction énergie libre n'est pas faisable et l'on a recours à une résolution numérique du problème

. Le modèle X-Y anisotrope en champ transverse 43

Ce modèle et sa dimensionnalité critique supérieure sont discutés d'abord.
On traite ensuite analytiquement le cas du système infini, puis numériquement le cas du système fini.
Viennent enfin la discussion des lois d'échelle et leurs conséquences.
On présente aussi des résultats sur des systèmes de spins plus grands que 1/2.

. Le modèle X-Y isotrope en champ transverse 53

Ce cas particulier du précédent peut être traité analytiquement pour toute taille finie de système.
La dimensionnalité critique supérieure du système avec interactions à courtes portées correspondant est trouvée différente de celle du modèle anisotrope.

pages

. Le modèle d'Ising Co ∞ avec champ transverse réel et champ longitudinal imaginaire 57

Comme précédemment, on développe pour ce modèle le calcul analytique des fonctions thermodynamiques du système infini. Puis viennent les résultats numériques sur des tailles finies et les vérifications des conséquences des hypothèses H 1 et H 2.

:: Conclusion 63

On donne quelques applications possibles de la méthode des tailles finies telle qu'elle est décrite ici, et de l'étude des systèmes Co ∞.

:: Appendice A A.1

On montre un théorème du genre Lemme de Watson qui permet, lorsque la fonction énergie libre est du type Landau, de développer toute fonction thermodynamique en perturbations à tout ordre au voisinage du minimum de l'énergie libre.

:: Appendice B B.1

On montre que l'intégrale d'une fonction ϕ par rapport à la mesure $z^m e^{-\frac{z^2}{2\alpha^2}}$ est une série entière en $\frac{1}{\alpha}$ dont les coefficients sont reliés simplement aux intégrales n-uples de ϕ.

:: Références R.1

LOIS DE FISHER ET BARBER

Lorsqu'un changement de phase du deuxième ordre a lieu dans un système constitué d'un ensemble infini de particules en interactions à courte portée, chaque grandeur thermodynamique développe à la transition une singularité mathématique, c'est-à-dire devient une fonction non analytique du paramètre critique. Expérimentalement, en ces points, ces grandeurs (susceptibilité magnétique, chaleur spécifique, longueur de corrélation,...) que nous noterons par le nom générique A, s'annulent ou deviennent infinies, souvent selon des lois de puissance du paramètre critique que nous appellerons g. Ainsi, si A diverge ou s'annule en $g = g_c$, nous poserons :

$$A \sim | g_c - g |^a \text{ lorsque } g \to g_c \qquad (1)$$

signifiant que, pour g dans un voisinage de g_c, la fonction $\frac{A}{|g - g_c|^a}$ est analytique de tous les paramètres du système (y compris de g).

Ce traitement permet d'isoler la partie singulière de la grandeur thermodynamique, la seule qui importe physiquement dans le cas d'un système infini, et de travailler désormais sur une expression de la forme :

$$A \sim | g_c - g |^a \; F_A \text{ (paramètres, } g_c - g) \qquad (g \to g_c) \qquad (2)$$

où a est l'exposant critique de la grandeur A et où F_A (paramètres, 0) est pour un jeu de paramètres fixé, un réel fini et non nul.

Physiquement, le changement de phase est toujours caractérisé par la divergence de la longueur de corrélation ξ du système, $\xi \sim | g_c - g|^{-\nu}$ au voisinage de g_c, ce qui signifie que les grandeurs physiques de tous ses éléments deviennent corrélés pour $g = g_c$. C'est cette propriété importante d'une transition que nous allons utiliser maintenant pour obtenir des informations complémentaires sur la fonction F_A.

Dans un système fini de taille L (nous supposerons implicitement dans tout ce qui suit, que les particules du système sont localisées sur un réseau, donc que le nombre N de particules est proportionnel à L^d où d est la dimensionnalité du système), le nombre de degrés de liberté est lui-même fini et

n'y a pas de transition de phase possible. Mais si L est fini mais grand, il est clair que les phénomènes collectifs responsables, dans le cas d'un système infini, de la transition, seront suffisamment importants pour que. localement, le système ne s'aperçoive qu'il est fini que lorsque g est suffisamment proche de g_c pour que la longueur de corrélation soit supérieure à la taille du système. Si l'on est proche de la transition (c'est à dire $L \to \infty$ et $g \to g_c$), la forme (2) peut être considérée comme un cas particulier ($L = \infty$) de l'expression plus générale :

$$A_L \sim | g_c - g |^a \; F_A \text{ (paramètres, } L, \xi) \qquad \left(\begin{smallmatrix} g \to g_c \\ L \to \infty \end{smallmatrix}\right) \qquad (3)$$

où A_L est la fonction thermodynamique correspondant à A, pour une taille finie L du système, et où F_A est une fonction uniformément continue en $L = \infty$, $g = g_c$.

Ceci étant posé, Fisher et Barber ont développé un argument simple permettant de prévoir certaines autres propriétés remarquables de la fonction F_A. L'hypothèse dite : de loi d'échelle, (Fisher and Barber (1972) ; Fisher (1974) ; Nightingale (1975) ; Kogut (1979) ; Hamer and Barber (1980) ; Hamer and Barber (1981)), consiste à supposer que, au voisinage de la transition, la seule longueur caractéristique du système est la longueur de corrélation. Ainsi la quantité importante pour la physique du système sera le paramètre L/ξ, c'est à dire la taille mesurée en unités de ξ, et non plus L et ξ séparément, le système se comportant comme un système fini dès que $\frac{L}{\xi} \ll 1$. Si l'on particularise les deux paramètres g et $\frac{L}{\xi}$, laissant constant le jeu des autres paramètres, on arrive à une expression du type :

$$A_L \sim | g_c - g |^a \; F_A \left(\frac{L}{\xi} \right) \qquad \left(\begin{smallmatrix} g \to g_c \\ L \to \infty \end{smallmatrix} \right)$$

où l'on sait déjà que la limite de $F_A(x)$, lorsque x devient infini, existe et est non nulle, et que F_A est continue en 0. Nous allons préciser ces derniers points : lorsque le système a une taille donnée L, finie, et que l'on fait tendre g vers g_c, le rapport $\frac{L}{\xi}$ tend vers 0, alors que, par exemple, $(g_c - g)^a$ devient infini, il est donc tout d'abord nécessaire que $F_A(0) = 0$, puisque A_L ne peut posséder de singularité en g_c. D'autre part, le système étant fini, la fonction thermodynamique est analytique de toutes ses variables

donc, au voisinage de g_c, on doit avoir $|g_c - g|^a F_A(|g_c-g|^\nu L) \sim 1$, si ν est l'exposant critique de la longueur de corrélation. D'où la forme habituelle des lois d'échelle de Fisher et Barber :

$$A_L \sim | g - g_c |^a F_A(\frac{L}{\xi}) \qquad (g \to g_c \ ; \ L \to \infty) \qquad (4)$$

avec : $\lim_{x\to\infty} F_A(x) = F_A(\infty) = \text{cste}$

$$F_A(x) \sim x^{-\frac{a}{\nu}} \qquad \text{pour } x \to 0$$

Ce qui revient aussi à dire que la fonction $F_A(L, \xi)$ définie en (3) se comporte comme une loi de puissance, de degré $-\frac{a}{\nu}$ près de g_c.

Une remarque s'impose ici : nous avons implicitement remplacé $|g_c - g|$ par $\xi^{-\frac{1}{\nu}}$ dans l'expression (2), ce qui signifie que la longueur de corrélation qui intervient dans les lois d'échelle sera la longueur de corrélation du système infini, et que nous noterons ξ_∞ lorsqu'il y aura ambiguïté. (Pour un système fini $\xi(L)$, qui peut être défini précisément comme nous le verrons plus loin, est en général différent de ξ_∞, à cause des effets de bord).

Conséquences

Deux cas importants sont a envisager : L est fini et $g \to g_c$, c'est-à-dire $\frac{L}{\xi} \to 0$, et $L \to \infty$ et g est proche et différent de g_c, c'est-à-dire $\frac{L}{\xi} \to \infty$.

1er cas : Si l'on veut étudier en $g = g_c$, comment le comportement du système fini approche le comportement critique lorsqu'on fait croître sa taille, on utilise la formule asymptotique de la fonction F_A en 0, pour écrire :

$$A_L \sim L^{-\frac{a}{\nu}} \qquad (L \to \infty)$$

Ainsi, si l'on sait calculer (numériquement, analytiquement ou expérimentalement) la grandeur A_L pour des tailles L suffisamment grandes, on pourra en déduire le rapport $\frac{a}{\nu}$ de deux exposants caractéristiques du système infini. Cette remarque, qui découle de l'hypothèse de loi d'échelle, est à la base de la méthode des tailles finies (bien développée par Nightingale (1976), (1977) ;

Sneddon (1978), (1979) ; Sneddon and Stinchcombe (1979) ; Hamer and Barber (1980), (1981), par exemple), qui consiste à extraire des informations sur le système infini, en n'étudiant que des systèmes finis du même type, ce qui correspond à un état d'esprit fondamentalement différent de la recherche directe d'une extrapolation.

2ème cas : Si la longueur de corrélation est finie et que la taille du système devient infinie, physiquement, il est clair que pour $L >> \xi$, le comportement du système fini ne sera pas très différent de celui du système infini, ce que l'on retrouve immédiatement à l'aide de (3) qui donne dans ce cas-là :

$$\lim_{L \to +\infty} A_L = F_A(\infty) \cdot | g_c - g |^a = A_\infty$$

Ici, le problème qui se pose est la forme de la convergence (souvent fonction exponentielle ou puissance de la taille), que l'on ne peut extraire de l'hypothèse de loi d'échelle. On voit alors toute l'importance que prend l'étude des tailles finies juste à la transition puisque celle-ci donne directement des résultats sur les exposants critiques du système infini.

Cette description des lois d'échelle de Fisher et Barber appelle tout de même quelques remarques importantes :

. Les premiers articles traitant de ce sujet (Fisher (1974) cite la forme (4) sans insister) mettent ces lois d'échelle sous la forme équivalente suivante :

$$A_L \sim L^{-\frac{a}{\nu}} G_A \left(\frac{L}{\xi} \right) \qquad g \to g_c, \; L \to \infty$$

avec

$$\lim_{x \to 0} G_A(x) = G_A(0) = \text{cste}$$

$$G_A(x) \sim x^{\frac{a}{\nu}} \qquad \text{pour } x \to \infty$$

(Il suffit de poser dans (3), $G_A\left(\frac{L}{\xi} \right) = \left(\frac{L}{\xi}\right)^{\frac{a}{\nu}} F_A \left(\frac{L}{\xi} \right)$). Nous utiliserons

généralement l'autre forme, mais uniquement par habitude et parce que sa forme $\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{L}{\xi_\infty}\right)$ nous paraît plus claire.

. Dans certains cas, par exemple, la chaleur spécifique dans le modèle Ising bidimensionnel, la forme (1) en loi de puissance de $g_c - g$ n'est plus valable et la divergence de la grandeur A se fait selon une loi du type Log $| g_c - g |$. Il faut alors, (Fisher and Barber (1972) ; Hamer and Barber (1981)), changer les expressions des lois d'échelle selon :

$$A_L(g) - A_L(g_o) = F_A\left(\frac{L}{\xi(g)}\right) - F_A\left(\frac{L}{\xi(g_o)}\right) \qquad \left(\begin{matrix} g \to g_c \\ L \to \infty \end{matrix}\right)$$

avec

$F_A(x) \sim$ Log x pour $x \to \infty$

$F_A(x) \sim$ Log x pour $x \to 0$

où g_o est une valeur donnée, différente de g_c, du paramètre critique.

On en déduit en particulier que : $A_L(g_c) \sim$ Log L pour L tendant vers $+\infty$.

. Les lois de Fisher et Barber sont typiquement vérifiées dans le cas où le système n'est pas du type champ moyen (Barber and Fisher (1973) ; Brézin (1982)). Plus précisément, si d_c est la dimensionnalité critique supérieure du système (Il s'agit de la dimensionnalité définie par : la physique du système est champ moyen si et seulement si la dimensionnalité d du système est supérieure à d_c), on trouve :

$$\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{L}{\xi}\right) \qquad \text{pour } d < d_c \qquad \text{(lois d'échelle vérifiées)}$$

$$\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{L\ \text{Log}^{\alpha} L}{\xi}\right) \qquad \text{pour } d = d_c \qquad \text{(lois d'échelle non vérifiées)}$$

$$\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{L}{\xi} L^{\alpha}\right) \qquad \text{pour } d > d_c \quad \text{(lois d'échelle non vérifiées)}$$

où, en général, l'exposant α' dépend de d.

En fait, le travail qui suit montre que les lois d'échelle peuvent être étendues à toutes les dimensionnalités à condition de prendre de "bonnes variables".

L'idée est que, les phénomènes de corrélation se faisant isotropiquement dans un milieu isotrope, il n'y a pas lieu de parler en termes de longueur, mais en termes de volume dans l'espace à d dimensions. Cela revient évidemment au même pour $d < d_c$, où l'on peut introduire une taille de corrélation : N_c, définie par : $N_c = \xi^d$, et les lois d'échelle pourront se mettre sous la forme :

$$\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{N}{N_c}\right) \qquad \text{où} \quad N = L^d$$

Du point de vue mathématique, nous n'avons rien fait, mais du point de vue physique, l'introduction d'une nouvelle quantité N_c, qui correspond au nombre de particules corrélées avec une particule origine, entraine quelques conséquences.

Lorsque $d > d_c$, la dimensionnalité n'apparaît pas explicitement dans les équations de la physique champ moyen, il faut donc supposer que la relation entre les deux grandeurs physique N_c et ξ , ne fait plus intervenir d. Pour retrouver le bon comportement en $d = d_c$, on est alors amené à adopter la forme :

$$N_c = (\xi)^{d_c} \qquad \text{dès que } d > d_c$$

Si l'on suppose alors que $\frac{N}{N_c}$ est une "bonne variable" du problème, c'est-à-dire que pour toute dimensionnalité, on a :

$$\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{N}{N_c}\right) \qquad \text{avec } N = L^d \quad \text{et } N_c = \xi^{\min\{d,\, d_c\}}$$

les lois de Fisher et Barber avec la longueur devront s'écrire alors :

$$\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{L}{\xi}\right) \qquad \text{pour } d < d_c$$

$$\frac{A_L}{A_\infty} = F_A\left(\frac{L}{\xi} L^{\frac{d-d_c}{d_c}}\right) \qquad \text{pour } d > d_c$$

avec la possibilité que, à $d=d_c$, le terme L^{d-d_c} se transforme comme il est usuel, en un terme logarithmique (Ce sont bien les résultats trouvés par Barber et Fisher (1973) et Brézin (1982)).

Le but de tout ce qui va suivre est de vérifier cet argument, à savoir : c'est le nombre de particules corrélées qui est physiquement important et non la portée (en dimension linéaire) des corrélations, et de mieux comprendre sur des exemples plus ou moins particuliers, ses diverses conséquences. En particulier pour un type d'interaction, et une symétrie du système donnés, la physique du système est du type champ moyen dans tout un domaine de dimensionnalité et de portées des interactions, et nous montrerons que dans ce domaine, la quantité N_c est exactement constante, ce qui sera le résultat important (Fig.3, p.34).

LES SYSTEMES A COORDINENCE INFINIE

Par le passé, les physiciens qui se sont intéressés à ces systèmes ne se sont apparamment pas préoccupés de leur donner un nom générique et systématique,(le premier article important à ce sujet, Kittel et Shore (1965) ne donne pas de nom)et les ont appelés selon leurs préoccupations de l'instant : "Van der Waals systems" (Vertogen and De Vries (1972) ; Dekeyser and Lee (1979) ; Dekeyser and Stella (1980) ; Stella and Dekeyser (1981) ; Kim and Lee (1981) ; Lee (1982)), "High density limit of ..." (Niemeijer (1970)),"constant two-body potential systems" (Dacol (1980)), "constant coupling approximation (Falk (1972)), "infinite range interaction systems" (Schneider and Pytte (1976)). Ici, et dans les articles correspondants, (Botet, Jullien and Pfeuty (1982) ; Botet and Jullien (1982 b),nous prendrons comme définition des systèmes à coordinence infinie (en anglais : infinitely coordinated systems) et noterons par la suite : système Co ∞, tout système de N particules en interaction, cette interaction ne dépendant ni de la position, ni de la nature des particules, (il est sous-entendu que N sera grand, le cas N = ∞ correspondant à la limite thermodynamique du système).

Cette définition appelle plusieurs remarques importantes :

. Le problème thermodynamique correspondant ne possède ni longueur caractéristique, ni dimensionnalité caractéristique. En particulier, il est indifférent d'imaginer les particules sur tel réseau à d dimensions ou situées au hasard dans l'espace, par exemple. La physique du système ne peut donc dépendre que de la dimensionnalité des paramètres d'ordre, de la taille (N) du système et de ses paramètres physiques (température, champ magnétique, anisotropie des interactions, ...).

. On suppose implicitement qu'il n'y a pas de"self-énergie", c'est-à-dire qu'une particule n'interagit pas directement avec elle-même.

. Les interactions sont toujours de type ferromagnétique, puisque toutes les particules sont équivalentes, et ne sont pas exclues des interactions de type Sherrington et Kirkpatrick (1975) c'est à dire aléatoires mais indépendantes de la position et de la nature des particules interagissantes.

Si l'interaction a lieu entre deux quantités physiques de type vectoriel par exemple, (vecteurs, spineurs, ...) l'Hamiltonien du système peut s'écrire généralement :

$$H = \alpha \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \Phi (\vec{K}_i, \vec{K}_j)$$

où nous supposerons que Φ est une fonction scalaire, symétrique des deux vecteurs $\vec{K}_i$ et $\vec{K}_j$ attachés aux particules i et j respectivement. Les seuls scalaires que l'on peut construire ainsi sont : $\vec{K}_i \vec{u}$ (où $\vec{u}$ est un vecteur fixe), $\vec{K}_i . \vec{K}_j$ et $\vec{K}_i \vec{K}_i$. Au premier ordre en $\vec{K}_i$ et en présence d'un champ local conjugué n_i, on doit avoir :

$$H = \alpha \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} (\vec{K}_i \vec{K}_j + \gamma(\vec{K}_i \vec{u})(\vec{K}_j \vec{u})) + \sum_i \vec{n}_i \vec{K}_i$$

On peut écrire, si l'on remplace les quantités locales : $\vec{K}_i$ et $\vec{n}_i$, par les quantités non locales $\vec{K} = \frac{1}{N} \sum_i \vec{K}_i$ et $\vec{n} = < \vec{n}_i >$,

$$H = \alpha N^2(\vec{K}^2 + \gamma(\vec{K} \vec{u})^2) + N(\vec{n} \vec{K}) + H_1$$

où l'on a posé

$$H_1 = - \alpha \left(\sum_i \vec{K}_i^2 + \gamma \sum_i (\vec{K}_i \vec{u})^2 \right) - \sum_i (\vec{n} - \vec{n}_i) \vec{K}_i$$

Dans la plupart des cas, (spins 1/2 en champ magnétique uniforme, n-vector model en champ magnétique uniforme,...) l'Hamiltonien H_1 est une constante indépendante de la configuration $\{ \vec{K}_i \}$, auquel cas nous la supposerons nulle quitte à décaler l'origine des énergies, et nous travaillerons directement sur l'Hamiltonien $H_0 = H - H_1$.

A ce niveau-là, nous pouvons faire trois remarques :

. Tout d'abord, comme la portée des interactions est infinie, la physique des systèmes à coordinence infinie sera du type champ moyen et pourra donc, en principe, être résolue facilement dans la limite thermodynamique

par des méthodes standard, mais il n'en est pas de même pour des tailles finies, et certains exemples devront être traités numériquement pour N fini, alors que l'on connaît la solution analytique pour N infini.

. La seconde remarque est que l'Hamiltonien H_o est en général plus facile à étudier que celui dont nous sommes partis et ceci, parce qu'on a remplacé un problème de N particules en interaction par un problème à un corps (qui, néanmoins, n'est en général pas semblable à une particule du système initial, car la transformation $\{ \vec{K}_i \} \longrightarrow \vec{K} = \frac{1}{N} \sum_i \vec{K}_i$ ne transforme pas simplement les contraintes existant sur les $\vec{K}_i$ en contraintes du même type sur le vecteur $\vec{K}$, qui "hérite" de tous les degrés de liberté de chaque $\vec{K}_i$).

. Enfin, le coefficient α qui apparaît dans l'Hamiltonien doit posséder une dépendance spéciale avec la taille du système, de manière à ce que, dans l'état fondamental, l'énergie par site soit finie à la limite thermodynamique, ce qui implique ordinairement que $\alpha = O(\frac{1}{N})$. Dans toute la suite, nous prendrons systématiquement α de la forme $-\frac{J}{N}$ en vérifiant a posteriori que la condition précédente est remplie.

UN EXEMPLE : LE MODELE DE BERLIN ET KAC Co_∞

L'exemple le plus simple, non trivial, de système à coordinence infinie que nous ayons trouvé est le modèle de Berlin et Kac Co_∞ (le modèle de Berlin et Kac avec interactions proches voisins est bien décrit dans Berlin and Kac (1952) et Barber and Fisher (1973). Le calcul analytique de la fonction de partition pour une taille finie N ne demande qu'un minimum d'effort et permet de mettre en évidence aisément les points-clés qui nous seront utiles par la suite.

L'Hamiltonien Co_∞ de Berlin et Kac a pour expression :

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sigma_i \sigma_j \qquad (5)$$

où les σ_i sont N variables réelles continues, soumises à la contrainte :

$$\sum_i \sigma_i^2 = \frac{N}{4} \qquad (6)$$

Notons tout de suite deux points qui auront leur importance :

. Ce modèle est un ersatz du modèle d'Ising Co_∞ de spins 1/2 en ce sens que les Hamiltoniens sont identiques mais la contrainte de Berlin et Kac est une variante affaiblie de la contrainte d'Ising (à savoir : $\sigma_i^2 = \frac{1}{4}$ pour tout i). C'est à dire que tout calcul thermodynamique sur le modèle d'Ising Co_∞ se ramène à un problème combinatoire (puisque les variables d'Ising sont discrètes) alors que ces mêmes calculs sur le modèle de Berlin et Kac sont directement d'ordre analytique donc généralement plus simples à résoudre.

. Le second point est que le modèle de Berlin et Kac est identique a modèle sphérique décrit comme la limite $n = \infty$ du n-vector model, comme il a été montré par Stanley (Stanley (1968)).

L'Hamiltonien (5) se diagonalise aisément par la méthode standard

décrite précédemment, et conduit à un Hamiltonien réduit :

$$H_o = - JN \left(\frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right)^2$$

avec, toujours, la contrainte (6).

On peut alors définir un paramètre d'ordre du système par :

$$\eta = < \sigma_i > = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i ,$$

il est évidemment compris entre $- \frac{1}{2}$ et $+ \frac{1}{2}$ d'après l'inégalité $\left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \leq N \sum_i \sigma_i^2$.

Si l'on introduit l'espace vectoriel R^N dont les vecteurs ont pour composantes les σ_i (on peut alors définir les vecteurs : $\vec{\Sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \cdots \sigma_N)$ et $\vec{u} = \frac{1}{N^{1/2}} (1, 1, \ldots, 1)$, on peut réécrire le problème sous la forme globale :

$$H = - J (\vec{u}\vec{\Sigma})^2$$

$$(\vec{\Sigma}.\vec{\Sigma}) = \frac{N}{4}$$

$$\eta = \frac{1}{N^{1/2}} (\vec{u}.\vec{\Sigma})$$

(une autre contrainte que (6) conduirait à une norme différente de la norme euclidienne dans l'expression $\| \vec{\Sigma} \|^2 = \frac{N}{4}$). Cette écriture est en fait plus simple car elle fait intervenir explicitement une structure vectorielle de dimensionnalité N plutôt que N espaces R couplés.

Cherchant une fonction de partition sous la forme :

$$Z_N = \sum_E G(E)\, e^{-\beta E} = \int_{-1/2}^{+1/2} g(\eta)\, e^{\beta JN\eta^2}\, d\eta ,$$

le premier travail consiste à calculer le nombre $g(\eta)$ de configurations correspondantes à une valeur donnée du paramètre d'ordre. Ce nombre correspond au volume

de l'intersection de l'hyperplan affiné $\eta = \eta_0$ (c'est à dire $(u.\Sigma) = N^{1/2}\eta_0$) avec l'hypersphère de rayon $\frac{1}{2} N^{1/2}$ centrée à l'origine. Cette intersection est une hyperphère de l'hyperplan $\eta = \eta_0$, de dimensionnalité N - 1, et possède un rayon égal à $N^{1/2} \left(\frac{1}{4} - \eta_0^2 \right)^{1/2}$. D'où le nombre de configurations :

$$g(\eta) = \frac{2\pi^{\frac{N-1}{2}}}{\Gamma(\frac{N-1}{2})} N^{\frac{N}{2}-1} \left(\frac{1}{4} - \eta^2 \right)^{\frac{N}{2}-1}$$

La fonction de partition peut alors s'écrire :

$$Z_N = K_N \int_{-1/2}^{+1/2} \frac{1}{1-4\eta^2} e^{-Nf(\eta)} \, d\eta$$

où $K_N = \frac{4}{\sqrt{N}} \cdot \frac{\left(\frac{1}{4} \pi N \right)^{\frac{N-1}{2}}}{\Gamma(\frac{N-1}{2})}$ ne dépend que de N et où $f(\eta) = -\frac{1}{2} \text{Log}(1-4\eta^2) - \beta J \eta^2$, indépendante de N, correspond, à des termes $\frac{1}{N} \text{Log}(1 - 4\eta^2)$ près (donc négligeables dans la limite thermodynamique) à une densité d'énergie libre du système.

En particulier, la valeur η_∞ du paramètre d'ordre pour le système de taille infinie, à l'équilibre, est donnée par l'équation de minimisation de f :

$$\frac{4\eta_\infty}{1 - 4\eta_\infty^2} = 2\beta J \eta_\infty$$

Cette équation ne possède que la solution triviale, $\eta_\infty = 0$, tant que $\beta J < 2$ et possède les deux solutions : $\eta_\infty = \pm \frac{1}{2}\left(1 - \frac{2}{\beta J}\right)^{1/2}$ quand $\beta J > 2$ (fig. 1).
Ceci correspond bien à une transition de phase du deuxième ordre à la température critique T_c, définie par la relation $\beta_c J = 2$ (où $\beta_c = \frac{1}{k_B T_c}$).

On retrouve en particulier l'exposant critique $\beta = \frac{1}{2}$ de l'aimantation à la transition, valeur bien caractéristique de la physique du type champ moyen

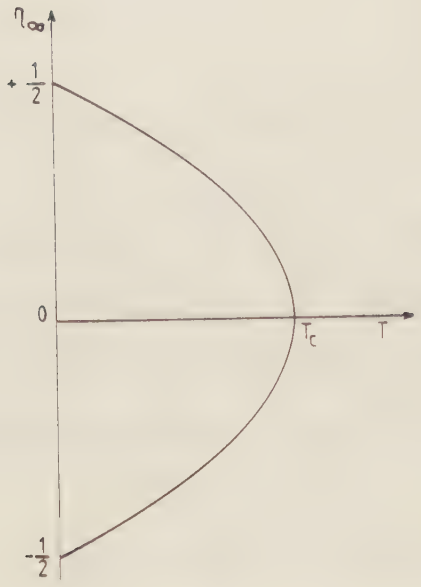

Fig. 1 - Aimantation en fonction de la température dans le modèle de Berlin et Kac Co ∞

Au voisinage de la température de transition, le paramètre d'ordre est petit et la densité d'énergie libre peut se développer en puissances de η selon :

$$f(\eta) = 2\ \frac{T_c - T}{T_c}\ \eta^2 + 4\eta^4 + \frac{32}{3}\eta^6 + \frac{32}{3}\ \eta^8 + O(\eta^{10}).$$

Sous cette forme, on peut directement l'assimiler à une énergie libre du type Landau à une seule variable η , sans terme en $|\nabla\eta|^2$, ce qui est convenable puisque le système est homogène.

Nous allons chercher à calculer maintenant l'aimantation, que l'on peut définir par :

$$M = (<\eta^2>)^{1/2} = \left(\frac{1}{N}\ \frac{\partial\ \mathrm{Log}\ Z_N}{\partial\ (\beta J)}\right)^{1/2}$$

pour tout N fini, à une température donnée (on pourrait définir l'aimantation différemment, par exemple $M_1 = <|\eta|>$, mais les conclusions seraient évidemment les mêmes).

Je donnerai ici l'idée de la méthode pour arriver au résultat, laissant en Appendice (A) la démonstration rigoureuse des points délicats.

Pour une température voisine de la température de Curie, T_c, la densité d'énergie libre possède son minimum absolu pour $\eta \simeq 0$. Dans des expressions du type :

$$\int_{-a}^{+a} G(\eta)\ e^{-Nf(\eta)}\ d\eta$$

la contribution importante à l'intégrale, lorsque N devient grand, a lieu pour η proche de η_o, abscisse du minimum absolu de f. On pourra donc développer f au voisinage de son minimum en puissances de $\eta - \eta_o$ et ne garder que les premiers termes du développement pour estimer l'intégrale.

Dans notre cas, ce traitement conduit à l'expression :

$$M^2 \sim \frac{\int_{-1/2}^{+1/2} \eta^2\ e^{-2N\frac{T_c - T}{T_c}\eta^2 - 4N\eta^4}\ d\eta}{\int_{-1/2}^{+1/2} e^{-2N\frac{T_c - T}{T_c}\eta^2 - 4N\eta^4}\ d\eta}$$

Effectuant alors le changement de variable : $N\eta^4 = u^4$ pour ne garder la dépendance en N que dans le terme quadratique de l'exponentielle, on arrive a

$$M^2 \sim \frac{1}{N^{1/2}}\ \frac{\int_R u^2\ e^{-2N^{1/2}\frac{T_c - T}{T_c}u^2 - 4u^4}\ du}{\int_R e^{-2N^{1/2}\frac{T_c - T}{T_c}u^2 - 4u^4}\ du}$$

cette formule étant vraie asymptotiquement, pour $N \to \infty$.
On peut alors introduire un nouveau paramètre N_c défini ici par :

$$N_c = \left(\frac{T_c}{T_c - T}\right)^2$$

de manière à particulariser le comportement critique de l'aimantation, pour $\frac{N}{N_c} \to +\infty$:

$$M \sim \left|\frac{T_c - T}{T_c}\right|^{1/2} \left(\frac{N_c}{N}\right)^{1/4} \left(\frac{\int_R u^2 e^{\pm 2(\frac{N}{N_c})^{1/2} u^2 - 4u^2} du}{\int_R e^{\pm 2(\frac{N}{N_c})^{1/2} u^2 - 4u^4} du} \right)^{1/2}$$

où $\pm$ est le signe de $T_c - T$.

Cette expression appelle deux remarques fondamentales :

- Pour une température T différente mais proche de T_c, l'aimantation peut se mettre sous la forme d'une loi d'échelle explicite en $\frac{N}{N_c}$, du type

$$M \sim |T_c - T|^{1/2} \; F\left(\frac{N}{N_c}\right)$$

où N est la taille du système et N_c une taille caractéristique qui diverge à la transition avec un exposant $\nu^* = 2$. De plus, F possède les "bonnes" propriétés des lois d'échelle, à savoir :

$$\lim_{x \to \infty} F(x) = \frac{1}{(4T_c)^{1/2}} = \text{constante}$$

et quand $x \to 0$:

$$F(x) \sim \left(\frac{\Gamma(\frac{3}{4})}{2T_c\,\Gamma(\frac{1}{4})}\right)^{1/2} x^{-1/4} = \text{loi de puissance en } x.$$

- Si l'on s'intéresse à la convergence de l'aimantation vers sa valeur limite, à température fixée, lorsque croît la taille du système, on s'aperçoit que :

. pour $T = T_c$, l'aimantation se comporte comme :

$$M \sim \frac{1}{N^{1/4}} \qquad \text{(coefficient de proportionalité } \left(\frac{\Gamma(\frac{3}{4})}{2\Gamma(\frac{1}{4})}\right)^{1/2}\text{)}$$

alors que :

. pour $T \neq T_c$, on a :

$$M^2 - M_\infty^2 \sim \frac{1}{N}, \text{ c'est à dire : } M - M_\infty \sim \frac{1}{N} \qquad \text{pour } T < T_c$$

$$M \sim \frac{1}{N^{1/2}} \qquad \text{pour } T > T_c$$

ce qui correspond aux exposants triviaux associés à la forme moyenne de l'expression de la fonction de partition.

Une dernière remarque a sa place ici, bien qu'elle ne découle pas du calcul précédent, mais du calcul rigoureux fait dans l'Appendice (A), c'est qu'il n'existe pas, sur ce modèle, de termes logarithmiques, tant en N, qu'en $T_c - T$.

Nous venons donc de montrer analytiquement sur le modèle de Berlin et Kac Co_∞ que :

- On peut définir une densité d'énergie libre qui ne dépend que d'un paramètre d'ordre homogène du système. De plus, celle-ci a la forme d'une fonctionnelle de Landau.

- Une quantité thermodynamique telle que l'aimantation peut s'écrire :

$$M \sim | T_c - T |^a F \left(\frac{N}{N_c} \right)$$

où a est l'exposant champ moyen de l'aimantation à la transition en température, F est une fonction régulière de son argument satisfaisant aux conditions : $F(x) \to$ constante quand $x \to +\infty$ et $F(x) \sim x^\omega$ quand $x \to 0$, et N_c est un paramètre sans dimension divergeant à la température critique avec un exposant caractéristique ν^* (égal à 2 dans ce modèle).

- A la température critique, la loi d'échelle d'une grandeur thermodynamique telle que l'aimantation, avec la taille du système est non triviale ($M \sim \frac{1}{N^{1/4}}$ dans ce modèle).

EXTENSION DES LOIS DE FISHER ET BARBER

On peut raisonnablement penser que les propriétés mises en évidence au sujet du modèle précédent sont plutôt représentatives du genre du système (coordinence infinie) que du système lui-même (Berlin et Kac). Aussi peut-on essayer de les généraliser a priori en faisant abstraction du modèle particulier.

Soit un système (S) de taille N, à coordinence infinie, possédant pour $N = \infty$, une transition de phase du deuxième ordre pour une valeur g_c d'un paramètre critique g, tous les autres paramètres étant par ailleurs fixés (g peut être la température, un champ transverse, ...). Alors toutes les grandeurs thermodynamiques décrivant le comportement du système (S) ne dépendent que de N et de g et présenteront en $g = g_c$ et $N = \infty$, des anormalités. Plus particulièrement, si A est une de ces grandeurs qui, pour $N = \infty$, diverge à la transition, elle s'écrira :

$$A \sim | g_c - g |^{a}$$

où a est l'exposant champ moyen de A.

- Hypothèse 1 (notée H 1 dans la suite) : il existe un nombre N_c, que nous appellerons taille de corrélation , ne dépendant que de g, qui diverge à la transition selon une loi du type : $N_c \sim | g_c - g |^{-\nu^*}$ où ν^* est positif, et défini par la propriété suivante : pour toute taille finie N du système (S), la grandeur thermodynamique A s'écrit :

$$A \sim | g_c - g |^{a} \; F_A \left(\frac{N}{N_c} \right)$$

où F_A est une fonction d'une variable définie sur R_+, vérifiant les propriétés suivantes :

$$F_A(x) \sim x^{\omega} \qquad \text{quand} \quad x \to 0$$

$$F_A(x) \sim \text{constante} \qquad \text{quand} \quad x \to +\infty$$

et a est l'exposant critique de la grandeur A, à la transition.

Entre autres conséquences, cette hypothèse contient implicitement le sens physique de N_c comme nous allons le voir maintenant :

- Conséquences :

Si l'on considère l'énergie interne par particule du système : $U = \frac{1}{N} < H >$, il vient, d'après H1 et la définition de l'Hamiltonien (H_o) :

$$U \sim U_\infty F_U \left(\frac{N}{N_c} \right) \qquad \text{avec } \lim_{x \to +\infty} F_U(x) = 1$$

et

$$U = \frac{\alpha}{N} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} < \vec{K}_i \vec{K}_j + \gamma(\vec{K}_i \vec{u})(\vec{K}_j \vec{u}) > \qquad \text{en champ extérieur nul}$$

U_∞ est la valeur limite de l'énergie interne par site, pour une taille de système tendant vers + ∞ (cette limite existe par le choix, au départ, de α).

Comme le système est homogène, on doit aussi avoir :

$$U = \alpha < \vec{K}_i \vec{K}_i(s) + \gamma(\vec{K}_i . \vec{u})(\vec{K}_i(s) . \vec{u}) >$$

où s est un sous-ensemble quelconque de (S) ne contenant pas i et $\vec{K}_i(s) = \frac{1}{c} \sum_{j \in s} \vec{K}_j$ est le valeur moyenne des $\vec{K}_j$ sur ce sous-ensemble (où c est le nombre de particules contenues dans s. En particulier, cette expression est vraie pour s = { j }, où j ≠ i, auquel cas, l'énergie interne par site apparaît comme la corrélation de deux particules différentes. D'un point de vue analytique, la fonction U est une fonction décroissante de la taille N, puisque, si H(N) désigne l'Hamiltonien du système N particules :

$$H(N) = H(N - 1) + \alpha \vec{h}_N . \vec{K}_N$$

où $\vec{h}_N$ est un champ local égal à $\sum_{j \neq N} (\vec{K}_j + \gamma(\vec{K}_j . \vec{u})\vec{u})$.

Pour toute configuration $\{ \vec{K}_i \}_{1 \leq i \leq N-1}$, le champ $\vec{h}_N$ est bien défini et le produit scalaire $\alpha \vec{h}_N . \vec{K}_N$ prend un ensemble de valeurs symétrique par rapport à l'origine. D'autre part, pour une configuration $\{\vec{K}_i\}_{1 \leq i \leq N-1}$ donnée, c'est-à-dire un $\alpha \vec{h}_N$ donné, les configurations de $\vec{K}_N$ qui rendent négatif le produit scalaire $\alpha \vec{h}_N \vec{K}_N$ sont, à l'équilibre, plus probables que les autres, autrement dit :

$< H(N) > \leq < H(N-1) >$ puisque $<\alpha \vec{h}_N . \vec{K}_N > \leq 0$ à l'équilibre.

La fonction $U(N) - U_\infty$ est ainsi une fonction positive décroissante de $\frac{N}{N_c}$ et tendant vers 0 lorsque $\frac{N}{N_c}$ devient infini (rappelons qu'ici g est fixé, différent et proche de g_c, dire que le rapport $\frac{N}{N_c}$ tend vers $+\infty$, revient à faire croître la taille du système vers l'infini). On peut déduire de ce calcul une interprétation physique du paramètre N_c. Il apparaît en effet comme la taille à partir de laquelle (c'est-à-dire, pour $N > N_c$) la corrélation entre deux éléments de l'ensemble devient négligeable. On peut exprimer cette dernière idée sous la forme légèrement différente suivante : un amas de N particules en interaction indépendante de la distance aura un comportement similaire à celui d'un amas infini dès que N sera très supérieur à N_c, de même que pour un amas de taille (linéaire) L de particules en interaction courte portée, le comportement sera similaire à celui d'un amas infini dès que L sera très supérieur à ξ , sa longueur de corrélation.

Remarques

. Dans le cas d'interactions entre proches voisins, les fonctions de corrélation suivent typiquement des lois en e^{-r/ξ_L} avec la distance, hors de la transition, et une loi de puissance de r à la transition, même pour des systèmes de taille finie L (par exemple : Brézin (1982)), ξ_L désignant alors la longueur de corrélation dans le système fini (définie par exemple par la racine carrée du moment d'ordre deux de la fonction de corrélation $<\vec{K}_i \vec{K}_j>$, c'est-à-dire :

$$\xi_L = \frac{\sum_{i,j} r_{ij} <\vec{K}_i \vec{K}_j>}{\sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} <\vec{K}_i \vec{K}_j>})$$

Néanmoins, on montre que, pour L grand, la fonction de corrélation définie de la même manière que dans le cas des systèmes Co ∞ (à savoir ici $\frac{1}{L^{2d}} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} <\vec{K}_i \vec{K}_j>$)

se comporte comme ξ_L donc en fonction décroissante de $\frac{L}{\xi_\infty} L^{\max(0, \frac{d - d_c}{d_c})}$

d'après les mêmes références. Ceci montre, en tout cas sur l'exemple du n-vector model, qu'il apparaît naturellement dans ce genre de systèmes (taille finie, interactions courte portée) une taille de corrélation $N_c = \xi_\infty^{d + \min(0, d_c - d)}$ définie de la même manière que précédemment, c'est-à-dire que tous les éléments de l'amas sont corrélés tant que $\frac{L^d}{N_c}$ est inférieur à l'unité.

. Grâce à l'hypothèse H 1, nous pouvons déjà prévoir quel sera le comportement des fonctions de corrélation avec la taille, à la transition. En effet, pour $g = g_c$ mais pour une taille finie, N, du système, il n'y a pas de changement de phase, donc la partie singulière de l'expression $|g_c - g|^a F_A(N |g_c - g|^{\nu^*})$ doit disparaître, lorsque $g \to g_c$. Comme $F_A(x) \sim x$ au voisinage de 0 et que ν^* est positif, la condition précédente s'écrit : $\omega = -\frac{a}{\nu^*}$ et toute fonction thermodynamique A, possède, en $g = g_c$, une loi d'échelle avec la taille du type :

$$A \sim N^{-\frac{a}{\nu^*}} \qquad \text{pour } N \to \infty$$

En particulier, ceci est vrai pour l'énergie interne par site donc pour la fonction de corrélation qui lui est égale, introduite précédemment. En fait, on trouve généralement que les fonctions de corrélation d'un système Co ∞ suivent des lois de puissance avec la taille, même hors de la transition, ce qui peut qualitativement s'expliquer par le côté diffus des systèmes à coordinence infinie rendant à portée infinie les fonctions de corrélation, contrairement aux systèmes avec interactions proches voisins où la localisation de toutes les particules implique des corrélations à courte portée.

Pour un système à coordinence infinie donné, on peut en général calculer exactement les exposants champ moyen du système infini, (la physique

étant simple, les calculs le sont aussi, plus ou moins). Le comportement asymptotique des grandeurs thermodynamiques sera alors clair si l'on connaît l'exposant critique ν^* de divergence de N_c. Il manque donc à ce stade une hypothèse supplémentaire qui nous décrira le comportement de la taille de corrélation au voisinage de la transition, ce que nous allons développer maintenant.

L'ARGUMENT

Pour un système avec interaction proches voisins de symétrie donnée (par exemple un réseau cubique), la coordinence est une fonction strictement croissante de la dimensionnalité (dans l'exemple du réseau cubique simple : $z = 2d$). Il en résulte qu'un système à coordinence infinie, de taille infinie, pourra être considéré comme la limite d'un système avec interactions proches voisins de dimensionnalité infinie. On sait d'autre part deux choses : tout d'abord, il existe une dimensionnalité critique supérieure d_c, telle que, pour $d > d_c$, le système est régi par une physique de type champ moyen, ensuite, les comportements critiques des grandeurs thermodynamiques ne dépendent plus de la dimensionnalité dans ce cas-là, le système "oublie" sa structure spatiale.

Du point de vue des comportements critiques (ce qui nous intéresse ici), on supposera donc que l'on peut identifier le système à coordinence infinie et le système à interactions courte portée de même symétrie, à une dimensionnalité $d > d_c$, avec la difficulté toutefois que, si l'on suppose l'hypothèse sur les lois d'échelle H 1 vérifiée, un problème se pose puisque l'on sait que pour $d > d_c$, les systèmes avec interactions à courte portée ne possèdent pas de lois d'échelle (du moins en $\frac{L}{\xi}$).

En fait, un petit raisonnement permet de trouver un argument de similarité cohérent : le système à coordinence infinie dont on part, est en fait un système homogène, isotrope (car il ne possède ni longueur, ni dimensionnalité intrinsèques), donc il n'y a pas de fluctuations du paramètre d'ordre. Pour un système correspondant mais avec interactions courte portée

et à une dimensionnalité égale à la dimensionnalité critique supérieure, l'anomalie des termes logarithmiques dans les lois d'échelle n'est due qu'aux fluctuations du paramètre d'ordre qui deviennent au voisinage de la transition du même ordre de grandeur que le paramètre d'ordre lui-même, phénomène qui change les lois d'échelle mais n'est pas suffisant pour modifier les exposants critiques qui sont toujours du type champ moyen. Il devient alors raisonnable dans le cas des systèmes Co ∞ de supposer, puisque les fluctuations du paramètre d'ordre sont absentes, que les termes logarithmiques doivent disparaître et que les lois d'échelle redeviennent valables.

Nous sommes alors conduits à énoncer l'hypothèse 2 que nous appellerons parfois l'argument des comportements similaires :

. Hypothèse 2 (appelée aussi H 2 dans la suite) :
le système à coordinence infinie possède un comportement critique similaire au système avec interactions proches voisins correspondant, celui-ci étant considéré à la dimensionnalité critique supérieure.

. Conséquences : Cette dernière hypothèse permet de calculer la seule quantité qui nous manquait après avoir admis l'hypothèse 1, à savoir la valeur de l'exposant critique ν^*. En effet, l'argument des comportements similaires permet d'identifier la taille de corrélation N_c du système Co ∞ et la taille de correlation ξ^{d_c} du système correspondant avec interactions courte portée à $d = d_c$. On en déduit immédiatement que :

$$\nu^* = \nu d_c$$

où ν est l'exposant critique champ moyen (nous le noterons parfois ν_{CM} pour insister sur ce point), décrivant la divergence de ξ au voisinage de la transition, pour le système de dimensionnalité d_c.

. Si l'on suppose les deux hypothèses H 1 et H 2 vérifiées, on a, pour toute grandeur thermodynamique du système à coordinence infinie :

$$A \sim |g_c - g|^{a_{CM}} F_A \left(\frac{N}{N_c}\right)$$

où a_{CM} est l'exposant champ moyen de A, F_A est une "bonne" fonction (voir H 1), et N_c la taille de corrélation qui diverge à la transition selon $N_c \sim |g_c - g|^{-\nu^*}$ et $\nu^* = \nu_{CM} d_c$. Il en résulte, à la transition, que :

$$A \sim N^{-\frac{a_{CM}}{\nu_{CM} d_c}}$$

La loi d'échelle avec la taille est non triviale et ne dépend que des exposants champ moyen (en général faciles à obtenir) et de la dimensionnalité critique supérieure du système avec interactions courte portée de même symétrie(parfois plus délicat à obtenir). Cette dernière remarque donne l'idée que l'on peut se servir de l'étude d'un système Co ∞, comme d'un outil pour trouver la dimensionnalité d_c d'un système avec interactions proches voisins.

. Remarques :

- H 1 est purement une hypothèse, c'est à dire qu'elle devra être testée systématiquement sur les exemples que nous étudierons. Par contre, H 2 est plus un argument qu'une hypothèse en ce sens qu'il s'appuie explicitement sur l'universalité des systèmes de symétrie donnée, dont la physique est du type champ moyen.

- A ce niveau, l'existence ou l'absence de termes logarithmiques dans les fonctions d'échelle ne sont qu'une supposition et l'on aurait très bien pu imaginer des lois d'échelle du type $\frac{A}{A_\infty} = F_A\left(\frac{N \mathrm{Log}^{\alpha} N}{N_c}\right)$ sans que cela ne change beaucoup les hypothèses et les conséquences. En fait, tous les exemples de systèmes que nous avons étudiés et dont nous allons parler plus loin, possèdent des lois d'échelle "normales" (sans terme logarithmique), (voir par exemple l'Appendice (A) pour la preuve dans le cas du système Berlin et Kac Co ∞), ce qui nous a amené à énoncer l'argument sous la forme H 2 après le raisonnement sur les fluctuations du paramètre d'ordre à l'équilibre au voisinage de la transition.

- Nous avons supposé implicitement dans tout ce qui précède que le système à coordinence infinie possédait une transition de phase du deuxième ordre pour une valeur non anormale du paramètre critique (si celui-ci est défini sur un intervalle [a, b], je veux dire que la transition n'apparaît pas en l'un des points a ou b), et que le système avec interactions courte portée correspondant possédait lui aussi une transition de phase du deuxième ordre pour une valeur non anormale (peut-être différente de la précédente) du paramètre critique correspondant, enfin, que ce même système

possédait, pour une dimensionnalité suffisamment grande, une physique du type champ moyen (ce qui revient à dire que sa dimensionnalité critique inférieure est inférieure à + ∞ et que sa dimensionnalité critique supérieure est supérieure à 0). Il serait intéressant (mais nous n'avons pas eu le loisir de le faire pour l'instant), de voir ce que deviendraient nos hypothèses dans des cas pathologiques où une ou plusieurs de ces suppositions n'étaient pas vérifiées.

. Exemple : le modèle de Berlin et Kac Co ∞.

On sait (Barber and Fisher (1973)), que le système courte portée correspondant possède une transition de phase du deuxième ordre en température et que sa dimensionnalité critique supérieure d_c est égale à 4. La physique champ moyen du système indique, pour l'aimantation, l'exposant critique $\beta_{CM} = \frac{1}{2}$, et, pour la longueur de corrélation, $\nu_{CM} = \frac{1}{2}$, donc, d'après les conséquences de H 1 et H 2, on doit avoir :

$$\nu^* = \frac{1}{2} \times 4 = 2$$

et

$$M \sim \frac{1}{N^{1/4}} \qquad \text{à la transition,}$$

ce qui est bien le résultat du calcul analytique direct.
Par ailleurs, on a montré sur cet exemple que l'hypothèse H 1 était bien vérifiée et que la loi d'échelle correspondante ne possédait pas de termes logarithmiques, ce qui est bien compatible avec H 2.

Nous allons maintenant vérifier tantôt analytiquement, tantôt numériquement ces hypothèses et leurs conclusions sur quelques exemples typiques de systèmes de spins.

PRINCIPE DES VERIFICATIONS ANALYTIQUES

Pour un système fini à coordinence infinie, toutes les grandeurs physiques sont homogènes, c'est à dire non locales. Il en est ainsi des paramètres d'ordre dont dépendent les grandeurs thermodynamiques, et l'on s'attend donc à ce que, pour un système ne possédant qu'un paramètre d'ordre scalaire, la fonction de partition, pour une taille N, s'écrive :

$$Z_N = \int_R g(\eta)\, e^{-\beta H(\eta)}\, d\eta$$

où, à la fois l'énergie $H(\eta)$ et la dégénérescence de l'intervalle $(\eta,\eta+d\eta)$, dépendent de N. La fonction énergie libre étant une fonction thermodynamique extensive, on peut généralement réécrire la fonction de partition sous la forme plus utile :

$$Z_N \sim \int_R g_o(\eta)\, e^{-N\beta f(\eta)}\, d\eta$$

à des termes négligeables à la limite thermodynamique près, et où l'on a omis une constante multiplicative qui, à la transition ne dépend que de N. Dans cette dernière formule, g_o désigne maintenant une fonction indépendante de N, de même que $f(\eta)$ et l'on supposera dans la suite que ces deux fonctions sont analytiques sur leur ensemble de définition, ce qui est une supposition très forte mais généralement vérifiée puisque l'on sait que pour des tailles finies toutes les grandeurs thermodynamiques sont analytiques de leurs arguments. Nous allons montrer maintenant que, sur ce genre de système, si la fonction densité d'énergie libre $f(\eta)$ peut s'écrire au voisinage de l'origine comme une fonctionnelle de Landau, à savoir :

$$f(\eta) = a(T - T_c)\eta^2 + b|\eta|^k + o(\eta^k)$$

où l'on suppose $k > 3$ et $b > 0$ de manière à ce qu'il existe une transition de phase du deuxième ordre, et où a et b n'ont pas de singularité en $T = T_c$,

la vérification des hypothèses H 1 et H 2 du chapitre précédent, se fait automatiquement. La moyenne du carré du paramètre d'ordre, qui, pour fixer les idées, représente généralement le carré de l'aimantation d'un système magnétique, ce qui justifie a priori le choix de la moyenne du carré plutôt que de la moyenne du paramètre d'ordre (celui-ci ayant d'ordinaire une probabilité égale d'être $+\eta$ ou $-\eta$), s'écrit ici :

$$< \eta^2 > \sim \frac{\int_R \eta^2 \, e^{a\beta N(T_c - T)\eta^2 - b\beta N|\eta|^k} \, g_0(\eta)\, d\eta}{\int_R e^{a\beta N(T_c - T)\eta^2 - b\beta N|\eta|^k} \, g_0(\eta)\, d\eta}$$

Le terme en $(T_c - T)\eta^2$ pouvant être soit positif, soit négatif selon la valeur de la température par rapport à T_c, il est commode de laisser au terme en η^k le travail de faire converger les intégrales. On peut alors poser comme nouvelle variable : $u = N^{1/k}\eta$ pour éliminer la dépendance en N de ce dernier terme et introduire un paramètre

$N_c = \left| \frac{T_c}{T - T_c} \right|^{\frac{k}{k-2}}$ que nous reconnaîtrons par la suite comme la taille de corrélation du système : Nous obtenons ainsi

$$< \eta^2 > \sim \frac{1}{N^{2/k}} \frac{\int_R g_0(uN^{-\frac{1}{k}})\, u^2 \, e^{\pm a\beta T_c \left(\frac{N}{N_c}\right)^{1-\frac{2}{k}} u^2 - \beta b|u|^k} \, du}{\int_R g_0(uN^{-\frac{1}{k}})\, e^{\pm a\beta T_c \left(\frac{N}{N_c}\right)^{1-\frac{2}{k}} u^2 - \beta b|u|^k} \, du}$$

et

$$\nu^* = \frac{k}{k-2}$$

où $\pm$ est le signe de $T_c - T$.

Comme g_0 est uniformément continue en 0, et que N tend vers $+\infty$, on peut écrire, pour $< \eta^2 >$, en faisant apparaître le comportement singulier avec la température :

$$(<\eta^2>)^{1/2} \sim \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right|^{\frac{1}{k-2}} \left(\frac{N_c}{N} \right)^{1/k} \left\{ \frac{\int_R u^2 e^{\pm a\beta T_c (\frac{N}{N_c})^{1-\frac{2}{k}} u^2 - b\beta |u|^k} du}{\int_R e^{\pm a\beta T_c (\frac{N}{N_c})^{1-\frac{2}{k}} u^2 - b\beta |u|^k} du} \right\}^{1/2}$$

La fonction g_0, comme on pouvait s'y attendre, n'influence pas la physique de la limite thermodynamique.

Cette dernière expression montre deux phénomènes :

. en $T \neq T_c$, la moyenne du paramètre d'ordre suit exactement une loi d'échelle du type de l'hypothèse H 1, c'est-à-dire :

$$<\eta^2>^{1/2} \sim | T - T_c |^a F \left(\frac{N}{N_c} \right)$$

où la fonction F est explicite, et en particulier possède les limites suivantes selon les valeurs de son unique argument :

$$\lim_{x \to +\infty} F(x) = 0 \quad \text{si } T > T_c \quad \left(\text{plus précisément : } F(x) \sim \frac{1}{(a\beta T_c^{\frac{k}{k-2}})^{1/2}} \frac{1}{x^{1/2}}\right)$$

$$\lim_{x \to +\infty} F(x) = \left(\frac{2a}{bk}\right)^{\frac{1}{k-2}} \quad \text{si } T < T_c \text{ (le terme suivant étant } O\left(\tfrac{1}{x}\right) \text{)}$$

et, pour x voisin de 0 : $F(x) \sim \frac{A}{x^{1/k}}$

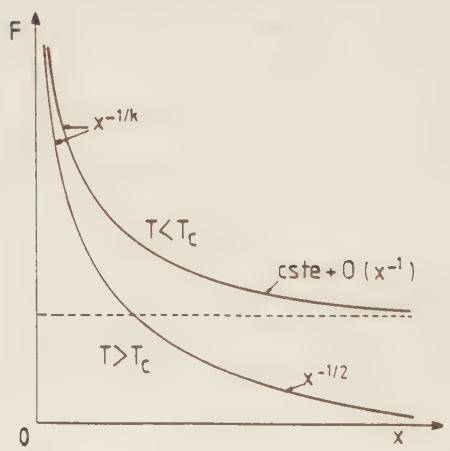

Fig. 2 - Allure de la fonction d'échelle en fonction de N/N_c

Il s'agit là d'une courbe théoriquement valable pour toutes les tailles N assez grandes du système et contient donc toutes les informations qui permettent de passer des tailles finies, au système infini, cas le plus intéressant physiquement. Nous trouverons d'ailleurs dans la suite (modèle d'Ising Co ∞ à T = 0, en champ transverse), un exemple de telle courbe pour lequel la forme de Landau de la densité d'énergie libre n'est pas connue . Ceci permet sur des cas non triviaux, de vérifier pleinement l'hypothèse de lois d'échelle H 1. Une telle allure de courbe n'est pas étonnante : pour x voisin de 0, c'est à dire T proche de T_c, c'est le terme en η^k de la fonction d'énergie libre qui est physiquement important et effectivement, le comportement asymptotique de F ne dépend plus que de k. Le terme en η^2 n'apparaissant que comme levée de dégénérescence des deux courbes, l'écart entre celles-ci est de l'ordre de $x^{1-\frac{3}{k}}$. Le cas particulier où k = 3 est significatif ici du saut de la fonction thermodynamique à la transition, caractéristique de la transition du 1er ordre. Au contraire, lorsqu'on est loin de la transition, seul le terme η^2 détermine la physique. Pour cette raison, le comportement de F lorsque x devient grand ne dépend pas de k, dont la seule contribution se retrouve au niveau des constantes.

. en T = T_c, il faut reprendre la première expression où apparaît N_c, et remplacer ce paramètre par + ∞ (ou, plus justement, faire $N_c^{-1} = 0$ dans toutes les expressions). On aurait pu aussi bien prendre les lois d'échelle avec x tendant vers 0, le résultat aurait évidemment été similaire. On arrive à une loi d'échelle avec la taille du type :

$$< \eta^2 >^{1/2} \sim \frac{\alpha_k}{N^{1/k}} \quad \text{où} \quad \alpha_k = \frac{1}{(\beta b)^k} \left(\frac{\Gamma(\frac{3}{k})}{\Gamma(\frac{1}{k})} \right)^{1/2}$$

Alors que, lorsque T ≠ T_c, les comportements de F(x) montrent que $< \eta^2 > - < \eta^2 >_\infty = 0(\frac{1}{N})$. Comme prévu, la loi d'échelle avec la taille à la transition est anormale et le système a, en ce point beaucoup plus de mal à s'approcher de la solution champ moyen qu'en des points réguliers.

Nous avons montré donc, sur l'exemple du moment d'ordre 2 du paramètre d'ordre, que la loi d'échelle du type Fisher et Barber en $\frac{N}{N_c}$ était rigoureusement valable et que,de plus,à la transition, le comportement avec

la taille se faisait avec un exposant caractéristique :

$$-\frac{1}{k} = \frac{a_{CM}}{\nu^*}$$

On a trouvé, en cours de démonstration : $a_{CM} = \frac{1}{k-2}$ et $\nu^* = \frac{k}{k-2}$. Reste maintenant à savoir si la relation prévue par l'argument développé au chapitre précédent, à savoir $\nu^* = \nu_{CM} d_c$ est, elle aussi, exacte. Pour cela, il faut considérer le système avec interactions proches voisins, correspondant au système Co ∞ que nous sommes en train d'étudier.

. Cas des interactions entre proches voisins

La physique du système avec interactions proches voisins, si l'on se place à une dimensionnalité plus grande que sa dimensionnalité critique supérieure, d_c, peut se décrire par une densité d'énergie libre du type Landau :

$$f(\eta) = a(T - T_c)\eta^2 + b|\eta|^k - \frac{1}{2} c\,|\nabla\eta|^2 \qquad \text{où } c \text{ est positif.}$$

Désormais, le paramètre d'ordre n'est plus homogène et dépend donc explicitement de la position, nous le noterons par la suite $\eta(\vec{r})$. Le système maintenant est infini et supposé invariant par translation, toutes les fonctions de deux positions $\vec{r}$ et $\vec{r}'$ seront donc fonctions de la distance relative $\vec{r} - \vec{r}'$. Si l'on introduit la susceptibilité généralisée χ du système, à un petit champ magnétique extérieur, on a :

$$\eta(\vec{r}) = \int d^d \vec{r}'\chi(\vec{r} - \vec{r}')\ h(\vec{r}')$$

La réponse du système à un petit champ $h(\vec{r})$ est donnée par :

$$2a(T - T_c)\eta(\vec{r}) + kb\frac{|\eta|^k}{\eta} - c\,\Delta\eta(\vec{r}) = h(\vec{r})$$

d'où, en passant à la variable χ et en remplaçant η^{k-2} par sa valeur à l'équilibre en champ nul, l'équation linéarisée :

$$2a(T - T_c)\,\chi(\vec{r}-\vec{r}') + k(k-1)b|\eta|^{k-2}\chi(\vec{r}-\vec{r}') - c\Delta\chi(\vec{r}-\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

La valeur de η_o obtenue par minimisation de la densité d'énergie libre lorsqu'il n'y a pas de champ magnétique, s'écrit :

$$kb\eta_o^{k-2} = 2a(T_c - T)$$

Ce qui montre en particulier que la valeur moyenne de η^2 se conduit comme $(T_c - T)^{2/(k-2)}$. L'équation linéarisée en χ devient alors très simple :

$$\alpha(T-T_c)\,\chi(\vec{r}-\vec{r}') - c\Delta\chi(\vec{r}-\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \qquad \text{où} \quad \begin{cases} \alpha = 2a(2-k) & \text{si } T < T_c \\ \alpha = 2a & \text{si } T > T_c \end{cases}$$

qui se résout immédiatement en passant en transformées de Fourier :

$$\chi(\vec{k}) = \frac{1}{c(k^2 + K^2)}$$

où k^2 représente le carré de la norme de $\vec{k}$ et où $K^2 = \frac{\alpha}{c}(T - T_c)$

Il est bien connu qu'alors, si l'on repasse dans l'espace réel, on obtient

$$\chi(\vec{r}) \propto \frac{e^{-Kr}}{r^{\frac{d-1}{2}}} K^{d-2}$$

où r est le module de $\vec{r}$.

Cette dernière expression montre en particulier, que, puisque $\langle \delta\eta(\vec{r})\delta\eta(\vec{o})\rangle = \frac{\chi(r)}{\beta}$, on peut assimiler K à l'inverse de la longueur de corrélation ξ du système.

On a donc :

$$\xi = \left(\frac{c}{\alpha(T-T_c)}\right)^{1/2}$$

d'où aussi : $\nu_{CM} = \frac{1}{2}$

D'autre part, cette même expression montre que les fluctuations du paramètre d'ordre sont singulières à la transition, et se comportent comme :

$$\langle \delta\eta^2 \rangle \sim |T - T_c|^{\frac{d-2}{2}}$$

Si l'on s'intéresse maintenant aux fluctuations du paramètre d'ordre par rapport au paramètre d'ordre lui-même, on obtient :

$$\frac{\langle \delta\eta^2 \rangle}{\langle \eta^2 \rangle} \sim (T_c - T)^{\frac{d-2}{2} - \frac{2}{k-2}}$$

Le critère de Ginzburg indique que tant que ce rapport reste faible, la physique champ moyen est valable, cela implique une dimensionnalité critique supérieure du système :

$$d_c = \frac{2k}{k-2}$$

On vérifie alors trivialement que :

$$\nu^* = \nu_{CM}\, d_c$$

puisque nous avons trouvé : $\nu^* = \frac{k}{k-2}$, $\nu_{CM} = \frac{1}{2}$, et $d_c = \frac{2k}{k-2}$.

Cette relation fondamentale entre un exposant critique d'un système Co $^\infty$ et un exposant analogue du système à courtes portées correspondant, a été prouvée ici analytiquement, alors qu'elle n'était montrée que grâce à un argument dans l'hypothèse H 2. Comme il s'agit ici de relier deux grandeurs analogues dans des cas limites (interactions du type coordinence infinie, c'est à dire en $\frac{1}{r^0}$ et du type plus proches voisins c'est à dire $\frac{1}{r^\infty}$) on peut se demander ce que devient la relation lorsqu'on considère des interactions longues portées du type $\frac{1}{r^p}$ par exemple où $0 < p < +\infty$. En fait, nous allons voir que la relation $\nu^* = \nu_{CM}\, d_c$, ne dépend pas dans ce cas, de p. Cette relation est donc bien caractéristique de la physique champ moyen, et non de la forme des interactions locales.

. Cas des interactions à longue portée

On considère le même système que précédemment, mais avec des interactions du type $J(r) = \frac{1}{r^{d+\sigma}}$, où l'on choisit $\sigma > 0$ pour que l'on puisse parler directement du système infini sans avoir à passer systématiquement à la limite thermodynamique (si ce n'était pas le cas, il faudrait

considérer des systèmes avec interactions $J_N(r) = N^{\frac{p}{d}-1} \frac{1}{r^p}$ où $0 < p < d$, de manière à ce que la limite des transformées de Fourier existe lorsque N tend vers $+\infty$, le calcul est similaire à celui qui suit mais plus lourd à manipuler). Si l'on refait le même calcul que précédemment sur la susceptibilité généralisée, il vient comme transformée de Fourier :

$$\chi(\vec{k}) = \frac{1}{c(k^\sigma + K^\sigma)}$$

où $K^\sigma = \frac{\alpha}{c}(T - T_c)$ et où k est la norme de $\vec{k}$.

Le terme en k^σ provient en fait de la transformée de Fourier de l'interaction, laquelle est de la forme $Ak^\sigma + Bk^2 + o(k^2)$ dans le cas de lois de puissance en $\frac{1}{r^{d+\sigma}}$. (Nijboer and De Wette (1977), Joyce (1974)).
L'expression précédente pour $\chi(\vec{k})$ n'est donc valable que pour $0 < \sigma < 2$, et il faut y remplacer σ par 2 dans le cas où $\sigma > 2$ (le cas $\sigma = 2$ faisant apparaître généralement des termes logarithmiques qui compliquent énormément les expressions). De même que précédemment, si l'on repasse dans l'espace réel, on a :

$$< \delta\eta^2(0) > = \frac{1}{\beta} \int \frac{d^d \vec{k}}{c(k^\sigma + K^\sigma)}$$

ce qui donne, par simple homogénéité :

$$< \delta\eta^2 > \sim K^{d-\sigma}$$

et ainsi on aboutit à la forme :

$$\frac{<\delta\eta^2>}{<\eta^2>} \sim (T_c - T)^{\frac{d-\sigma}{\sigma} - \frac{2}{k-2}}$$

Les fluctuations du paramètre d'ordre seront donc du même ordre de grandeur que le paramètre d'ordre lui-même dès que $\frac{d-\sigma}{\sigma} = \frac{2}{k-2}$, ce qui conduit à une dimensionnalité critique supérieure :

$$d_c = \frac{\sigma k}{k-2}$$

D'autre part, dans l'espace réel, la susceptibilité généralisée s'écrit :

$$\chi(\vec{r}) = \int \frac{d^d \vec{k}\ e^{i\vec{k}\vec{r}}}{c(k^\sigma + K^\sigma)}$$

cequi peut se mettre sous la forme plus compacte : $\chi(\vec{r}) \propto K^{d-\sigma} F(Kr)$.

La grandeur K apparaît donc à nouveau comme l'inverse de la longueur de corrélation du système et son exposant champ moyen est donc

$$\nu_{CM} = \frac{1}{\sigma}$$

On vérifie à nouveau sur cet exemple que :

$$\nu^* = \nu_{CM}\, d_c$$

identité qui apparaît bien plus générale que ce qu'annonce l'argument du chapitre précédent, car indépendante de la portée des interactions. En fait, on trouve que, pour ce genre de système, ν^* a une valeur constante dans tout le domaine où la physique est du type champ moyen. En particulier cela reste vrai à la frontière de ce domaine où l'on peut calculer cet exposant par continuité du produit $\nu.d$ lorsque la dimensionnalité d "tend" vers la dimensionnalité critique supérieure d_c (au sens de la limite d'un prolongement analytique en d).

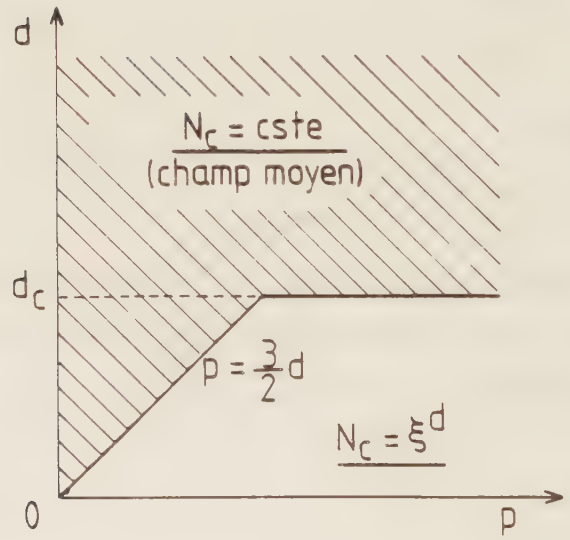

Fig. 3 – Expression de N_c en fonction de la portée des interactions et de la dimensionnalité du système.

L'HAMILTONIEN D'ISING CO ∞ DE SPINS1/2 ET LES MODELES QUANTIQUES QUI S'Y RATTACHENT

Les systèmes à coordinence infinie de particules magnétiques peuvent être typiquement de deux sortes selon que les moments magnétiques individuels sont représentables par des spins (quantiques) ou par des vecteurs (classiques). Lorsqu'on modélise le système de particules par un système de vecteurs, on impose souvent une contrainte sur ceux-ci de manière à mettre un ingrédient un peu quantique dans le modèle et donc de mieux simuler la réalité qui, elle, est quantique. Ces contraintes ont généralement pour but de donner plus de poids statistique aux valeurs permises par la mécanique quantique, tout en continuant à travailler avec des variables continues, ce qui est analytiquement plus agréable.
Dans ce genre d'idées, nous étudierons dans la suite des systèmes quantiques de spins 1/2 et des systèmes "n-vector model", la clé de voute étant le système d'Ising de spins 1/2.

. Le modèle d'Ising Co ∞.

Je reprends ici, pour le système d'Ising Co ∞ de spins 1/2, un calcul effectué par Kittel et Shore en 1965 et détaillé par Niemeijer en 1970 sur le modèle d'Heisenberg à coordinence infinie, laissant au paragraphe suivant la discussion de ce dernier système. Il s'agit d'étudier un Hamiltonien du type :

$$H = -\frac{J}{N}\left(\sum_i S_i^z\right)^2$$

par une assemblée de N spins 1/2.

Dans ce modèle, le spin total selon l'axe z est le seul nombre quantique intéressant et la dégénérescence correspondante suit une loi binomiale du type :

$$g\left(\sum_i S_i^z = m\right) = \text{nombre d'états de } \frac{N}{2} - m \text{ spins retournés} = C_N^{(N/2)-m}$$

On a bien sûr, $\sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} C_N^{(N/2)-m} = 2^N$: nombre total d'états possibles.

La fonction de partition du système fini a comme expression :

$$Z_N(\beta J) = \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{+\frac{N}{2}} C_N^{(N/2)-m} \; e^{\frac{\beta J}{N} m^2}$$

expression combinatoire simple mais analytiquement compliquée.

On peut définir l'aimantation par : $M = \left(\frac{1}{N} \frac{\partial \mathrm{Log} Z_N}{\partial(\beta J)} \right)^{1/2}$, ce qui revient à

poser $M^2 = \left(\frac{1}{N} \sum_i S_i^z \right)^2$. Il s'agit d'une définition pratique parmi toutes celles qui sont possibles. En particulier Kittel et Shore avaient pris $M = \left| \frac{1}{N} \sum_i S_i^z \right|$, ce qui complique légèrement les sommations que l'on doit effectuer par la suite. Si l'on transforme la fonction de partition à l'aide de l'identité

$$e^{\frac{\beta J m^2}{N}} = \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_R e^{-t^2 + 2(\frac{\beta J}{N})^{1/2} mt} \, dt$$

et en interchangeant l'ordre de sommation et d'intégration, on aboutit à l'expression analytique de Z_N :

$$Z_N(\beta J) = \frac{2^N}{\pi^{1/2}} \int_R e^{-t^2} \, \mathrm{ch}^N\left((\tfrac{\beta J}{N})^{1/2} t \right) dt$$

Pour se ramener à une notation usuelle, on peut poser pour nouvelle variable : $\eta = \frac{t}{(\beta J N)^{1/2}}$. On trouve alors une fonction de partition du type :

$$Z_N(\beta J) = 2^N \left(\frac{\beta J N}{\pi}\right)^{1/2} \int_R e^{-N\beta f(\eta)} \, d\eta$$

où maintenant :

$$f(\eta) = J\eta^2 - \frac{1}{\beta} \text{Log ch}(\beta J\eta)$$

est une fonction indépendante de la taille du système.
Avant de poursuivre la discussion, il est nécessaire de comprendre la relation qui existe entre M, le paramètre d'ordre que nous avons défini et η qui n'apparaît pour l'instant que comme variable auxiliaire.

En calculant explicitement $M = \left(\frac{1}{N} \frac{\partial(\text{Log } Z_N)}{\partial(\beta J)} \right)^{1/2}$, en fonction de η, il vient :

$$M^2 = \frac{1}{2\beta JN} - \left\langle \frac{\partial(\beta f(\eta))}{\partial(\beta J)} \right\rangle$$

$$= \frac{1}{2\beta JN} - \langle \eta^2 - \eta \text{th}(\beta J\eta) \rangle$$

Une intégration par parties donne $\langle \eta \text{ th}(\beta J\eta) \rangle = - \frac{1}{\beta JN} + 2 \langle \eta^2 \rangle$, d'où

en définitive :

$$M^2 = \langle \eta^2 \rangle - \frac{1}{2\beta JN}$$

A la limite thermodynamique, la variable η est alors un bon paramètre d'ordre du système, et, pour une taille finie, les comportements de M^2 et de $\langle \eta^2 \rangle$ seront analogues (cela provient du fait que $M^2 - M_\infty^2 = O(\frac{1}{N})$ hors de la transition et $M \sim \frac{1}{N^\alpha}$ où $0 < \alpha < 1/2$, à la transition).

D'autre part, lorsque η est voisin de l'origine (lorsqu'on est proche donc de la transition), on peut développer la densité d'énergie libre selon une forme de Landau :

$$\frac{1}{J} f(\eta) = \frac{T - T_c}{T_c} \eta^2 + \frac{2}{3} \eta^4 - \frac{32}{45} \eta^6 + \frac{272}{315} \eta^8 + O(\eta^{10})$$

où la température critique T_c est définie par la relation : $\beta_c J = 2$.
D'après ce que nous avons dit, on a alors :

$$M = O\left(\frac{1}{N^{1/4}}\right) \qquad \text{à la transition,}$$

c'est tout à fait compatible avec ce que nous savons par ailleurs pour

le système d'Ising avec interactions entre proches voisins :

$$\beta_{CM} = \frac{1}{2}$$

$$\nu_{CM} = \frac{1}{2}$$

et une dimensionnalité critique supérieure égale à 4

$$\frac{1}{4} = \frac{\beta_{CM}}{\nu_{CM}\, d_c} \quad .$$

La décroissance vers la solution nulle est donc dans ce cas anormalement lente par rapport à ce qui se passe hors de la transition. Il faut considérer un nombre de particules énorme pour "voir" la solution champ moyen du système ce qui discrédite toute simulation numérique de ces systèmes pour des tailles trop faibles lorsqu'on est proche de la transition. Pour fixer les idées, sur ce système, le fait de prendre 10 000 particules, nombre tout à fait considérable pour un ordinateur, conduirait de manière brute à une précision de l'ordre de 10 % sur l'aimantation. Cette anomalie de convergence est par ailleurs reliée directement à un phénomène mathématique très intéressant, mais que je ne ferai que mentionner ici. Si l'on construit une suite de fonctions analytiques dépendantes d'un nombre croissant de paramètres (par exemple pour fixer les idées : une suite de polynomes de degrés croissants), et si cette suite converge vers une fonction non analytique en un point isolé, la convergence locale se fait automatiquement plus lentement en ce point, qu'au voisinage d'un autre point où la fonction limite est analytique. Qualitativement, on peut dire qu'il faut un petit nombre de paramètres pour bien décrire l'allure de la courbe en un point régulier (penser à la convergence de la série de Taylor par exemple) alors qu'il faut avoir "presque tous" les paramètres (: équivalent au phénomène collectif en physique) pour décrire une irrégularité comme une rupture de pente par exemple. Ce phénomène est tout à fait évident sur les figures que nous obtiendrons pour comparer diverses tailles, celle qui suit est extraite de Kittel and Shore (1965) sur le modèle Heisenberg Co ∞ dont je vais maintenant parler (fig. 4).

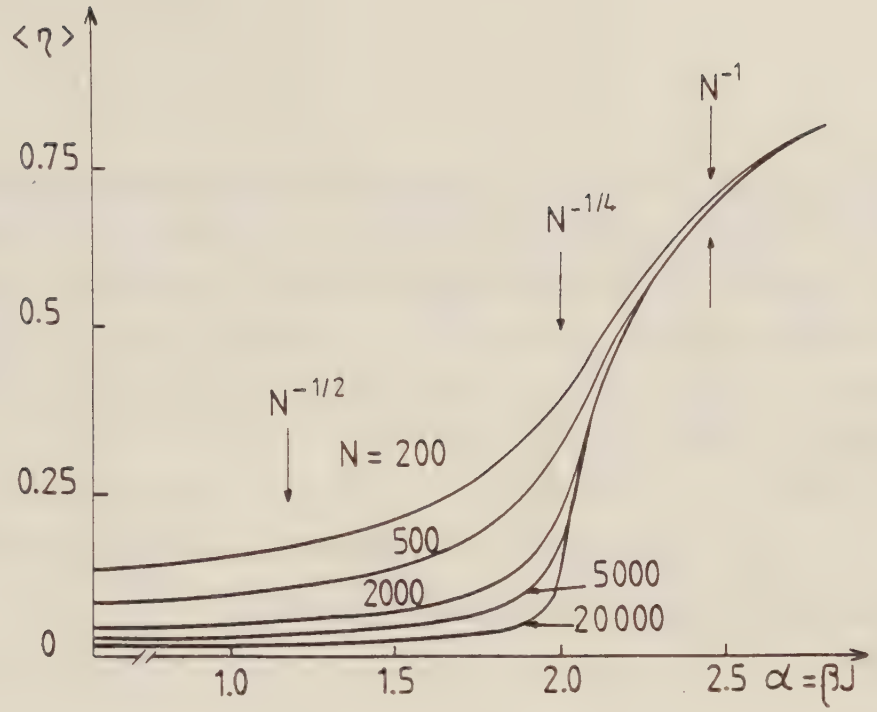

Fig. 4 - Aimantation en fonction de la température pour N fini (Kittel et Shore, 1965).

. Le modèle d'Heisenberg Co ∞

Kittel et Shore (1965) avaient déjà remarqué que, à la limite thermodynamique, les calculs des fonctions de partition des modèles Ising Co ∞ et Heisenberg Co∞ pour des spins 1/2, donnaient des résultats identiques à la limite thermodynamique. Niemeijer (1970) parvint à la même conclusion, mais ce sont Vertogen et De Vries (1971) qui donnèrent la démonstration précise que ces deux modèles quantiques, pour des spins quelconques, sont complètement équivalents pour des tailles infinies de système.
Cela provient du fait que l'on peut remplacer l'étude d'un système de N spins S par l'étude d'un unique spin NS. Les spectres du spin total et du spin total selon un axe z sont similaires et l'on montre que la densité d'états dans les deux cas est identique à la limite thermodynamique, ce qui implique leur résultat.

. Le modèle Ising Co ∞ avec champ conjugué aléatoire.

L'exemple qui suit est tiré d'un article de Schneider et Pytte (1976), au moins pour le calcul de la fonction de partition sous sa première forme. Il est intéressant, tout d'abord parce que c'est un modèle entièrement soluble dans lequel apparaît un changement de phase du deuxième ordre

entre un état ferromagnétique et un état de spins indépendants, c'est à dire que dans ce dernier cas, les spins s'alignent sur le champ conjugué local aléatoire qui est en compétition avec le couplage ferromagnétique à coordinence infinie. D'autre part, le système courtes portées correspondant est loin d'être bien connu, aussi tous les resultats que nous obtiendrons comme conséquences de la théorie que nous venons de développer peuvent être intéressants.

Nous partirons d'une assemblée de N spins 1/2, régie par un Hamiltonien du type Ising Co ∞ :

$$H = -\frac{J}{N}\left(\sum_i S_i^z\right)^2 - \sum_i h_i\, S_i^z$$

où le champ h_i est un champ local aléatoire distribué selon une loi de probabilité Gaussienne :

$$P(h) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma}\, e^{-\frac{h^2}{2\sigma^2}}$$

On trouve alors une densité d'énergie libre de la forme :

$$\beta f(\eta) = \beta J \eta^2 - \int_R dh\, P(h)\, \mathrm{Log}\left\{\frac{\mathrm{ch}(\beta J\eta + \beta h)}{\mathrm{ch}(\beta h)}\right\}$$

où, à l'équilibre, le paramètre d'ordre décrivant l'aimantation est donné par l'équation self-consistante :

$$\eta = \langle\langle S_i^z \rangle\rangle_h = \int_R dh\, P(h)\, \mathrm{th}(\beta J\eta + \beta h)$$

et le paramètre d'ordre d'Edwards et Anderson (Edwards and Anderson, 1975) correspondant à l'existence ou à la non-existence de moments magnétiques individuels est donné par :

$$q_2(\eta) = \langle\langle S_i^z > ^2\rangle_h = \int_R dh\, P(h)\, \mathrm{th}^2(\beta J\eta + \beta h)$$

Si l'on pose, plus généralement :

$$q_n(\eta) = \langle\langle S_i^z \rangle^n \rangle_h = \int_R dh\ P(h)\ th^n(\beta J\eta + \beta\ h)$$

et

$$q_n = q_n(o)$$

(on a évidemment, $q_n = 0$ si n est impair et, si n s'écrit $n = 2m$, la suite (q_{2m}) est strictement décroissante, positive et, de plus : $0 < q_{2m} < \frac{1}{4^m}$), la densité d'énergie libre se développe au voisinage de l'origine selon les puissances de η comme :

$$\beta f(\eta)=\beta J\eta^2(1-\frac{\beta J}{2}(1-q_2))+\frac{\beta^4J^4\eta^4}{12}(1-4q_2+3q_4)-\frac{\beta^6J^6\eta^6}{45}(1-\frac{17}{2}q_2+15q_4-\frac{15}{2}q_6)+\ldots$$

On remarque que, si l'on pose $\sigma = 0$, c'est à dire $P(h) = \delta(h)$, on retrouve (puisqu'alors : $q_n = 0$ pour tout n) la fonction densité d'énergie libre du modèle d'Ising à coordinence infinie sans champ.
Dans le cas où $\sigma > 0$, on peut mettre $f(\eta)$ sous la forme plus compacte suivante :

$$f(\eta)=\beta J\eta^2(1+\frac{J}{2}\int_R dhP'(h)th(\beta h))+\frac{\beta^2J^4\eta^4}{24}\int_R dhP''(h)th^2(\beta h)-\frac{\beta^2J^6\eta^6}{720}\int_R dhP'''(h)th^2(\beta h)+O(\eta^8$$

Maintenant, la température critique dépend de la distribution du champ aléatoire et plus précisément, elle est définie de manière implicite par l'équation :

$$\frac{2}{J} = -\int_R dh\ P'(h)\ th(\beta_c h)$$

Pour les hautes températures, c'est à dire $\beta\sigma << 1$, on a :

$$\frac{\beta_c J}{2} = 1 + (\frac{2\sigma}{J})^2 + O((\frac{2\sigma}{J})^4)$$

Ce système, à faible dispersion du champ magnétique (ou, ce qui revient au même à haute température et grand coefficient de couplage ferromagnétique), est donc très voisin du système Ising Co ∞ , les fluctuations thermiques rendant inefficace la présence d'un petit champ magnétique aléatoire.
Le système étudié, pour $\beta\sigma >> 1$, c'est à dire à très basse température et

forte dispersion est plus intéressant car physiquement, les deux seuls paramètres qui restent en compétition sont la dispersion σ et le couplage ferromagnétique J, et mathématiquement, tous les coefficients de $\beta^4 J^4 \eta^4$, $\beta^6 J^6 \eta^6$, ..., s'annulent.
Une analyse plus fine, faite avec l'aide des résultats de l'Appendice (B) sur le comportement asymptotique des intégrales de type $\int P^{(k)}(h) th^p(\beta h) dh$, permet de conclure que dans la limite où $\beta\sigma$ tend vers $+\infty$ on a :

$$\frac{(2\pi)^{1/2}}{J} f(\eta) = \eta^2 \left((2\pi)^{1/2} - \frac{J}{\sigma} \right) + \frac{1}{12} \left(\frac{J}{\sigma} \right)^3 \eta^4 + \frac{3}{8} \left(\frac{J}{\sigma} \right)^5 \eta^6 + O(\eta^8)$$

qui montre que, même à la température nulle, la forme de Landau de la densité d'énergie libre est valable, avec un terme en η^4 non nul.

D'après ce que nous avons vu sur les systèmes à coordinence infinie, il s'agit ici du cas standard où la dimensionnalité critique supérieure du modèle courtes portées correspondant est égale à 4... Ce qui est compatible avec des résultats obtenus par des raisonnements tout à fait différents (Imry and Ma, 1975) qui indiquent que pour des modèles avec interactions entre proches voisins et champ aléatoire local, on doit avoir $d_c = 4$ pour le modèle d'Ising (et $d_c = 6$ pour le n-vecteur model, si $n \neq 1$).

EXEMPLES NUMERIQUES

Dans la plupart des systèmes Co ∞ de taille finie, le calcul analytique de la fonction de partition semble trop compliqué pour être mené exactement. On a alors recours à un traitement numérique sur ordinateur pour la taille finie, et un traitement analytique (champ moyen) pour la taille infinie. Le fait déjà mentionné que l'on peut généralement remplacer un système de N particules en interaction par une seule "grosse" particule avec de nouvelles contraintes sur ses degrés de liberté, permet de simplifier énormément le problème thermodynamique correspondant, et donc de résoudre numériquement des systèmes de tailles finies très grandes (pour des systèmes déjà assez compliqués comme le modèle d'Ising quantique en champ transverse, on peut considérer sans problème des tailles de plusieurs centaines de particules) mais nous nous limitons dans la suite à une taille maximale de 100 particules pour des problèmes de lecture de figure.

Dans le cas des interactions à courtes portées, il est connu que les systèmes quantiques à température nulle peuvent se comporter comme des systèmes classiques de dimensionnalité plus grande, à température finie (Kogut, 1979). La dimensionnalité critique supérieure d'un système quantique présentant une transition dans son état fondamental est donc plus petite que celle de son équivalent classique présentant une transition en température. Ainsi des systèmes quantiques à température nulle pourront être des exemples utiles de systèmes de dimensionnalités critiques supérieures variées.

. Le modèle X-Y anisotrope en champ transverse

L'Hamiltonien de ce modèle, considéré pour un système de N particules de spins S (nous ne nous restreignons pas pour le moment à des spins 1/2), est donné par

$$H = -\frac{1}{NS} \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + \gamma S_i^y S_j^y) - \Gamma \sum_i S_i^z$$

où γ est un paramètre d'anisotropie (le cas où $\gamma = 1$ correspond au cas X Y isotrope en champ transverse, que nous traiterons plus loin), et Γ est le champ transverse. La constante de couplage ferromagnétique a été normalisée de manière à ce que la transition du système infini ait lieu pour $\Gamma_c = 1$. Nous nous sommes restreint au cas où $0 < \gamma < 1$ dans la suite, le cas $\gamma > 1$ se déduisant du précédent par les transformations $\gamma \to \frac{1}{\gamma}$ et $\Gamma \to \frac{\Gamma}{\gamma}$.

La version avec interactions proches voisins de ce modèle a été bien étudiéedans le passé (par sa résolution analytique à une dimension (Pfeuty, 1970 ; Barouch and Mac Coy, 1971) et pour des dimensionnalités plus grandes, par des développements en série (Pfeuty and Elliott, 1971), et groupe de renormalisation dans l'espace direct (Jullien, Pfeuty, Fields and Doniach, 1978 ; Penson, Jullien and Pfeuty, 1979) par exemple.

Dans le cas anisotrope ($\gamma \neq 1$), ce modèle quantique à d dimensions, développe une transition de phase du deuxième ordre en champ transverse, à température nulle, qui a le même comportement critique que la transition en température du modèle Ising classique anisotrope à d + 1 dimensions. Dans cette équivalence, le gap G entre l'état fondamental et le premier état excité correspond à l'inverse de la longueur de corrélation dans la dimension supplémentaire du modèle équivalent classique. Il en résulte en particulier que le gap suit une loi d'échelle avec la taille de la forme :

$$G \sim \frac{1}{L} \qquad \text{en} \qquad \Gamma = \Gamma_c$$

C'est à dire encore que l'exposant dynamique z (défini par $G \sim L^{-z}$ à la transition) est exactement égal à 1. Comme conséquence directe de cette équivalence, la dimensionnalité critique supérieure du système quantique considéré est celle du système classique équivalent diminuée de 1, donc ici :

$$d_c = 3$$

Dans la suite, nous avons porté notre attention sur deux grandeurs thermodynamiques : le gap G entre l'état fondamental et le premier état excité

et l'aimantation M définie, parmi plusieurs définitions possibles, par :

$$M^2 = \frac{1}{(NS)^2} \langle (\sum_i S_i^x)^2 \rangle = \frac{1}{(NS)^2} \langle 0 | (\sum_i S_i^x)^2 | 0 \rangle$$

où la moyenne est prise dans l'état fondamental.
L'avantage de cette définition est qu'elle coïncide avec celle de l'aimantation dans le système à courtes portées et que M^2 correspond dans le cas des coordinences infinies à la fonction de corrélation de spins $\langle S_i^x S_j^x \rangle$.
D'autres définitions de l'aimantation auraient pu être prises (nous en avions déjà parlé dans le cas Ising classique) et les résultats n'auraient différé que par des termes en $\frac{1}{N}$, qui n'affecteraient pas les comportements d'échelle que nous allons trouver.

. Résultats champ moyen

On sait que l'on peut écrire l'Hamiltonien sous la forme plus compacte :

$$H = -\frac{1}{2NS} \{(J^x)^2 + \gamma (J^y)^2\} - \Gamma J^z + \frac{1}{2NS} (K^x + \gamma K^y)$$

où $J^\alpha = \sum_i S_i^\alpha$ est le spin total dans la direction α et $K^\alpha = \sum_j (S_i^\alpha)^2$. Lorsque la taille du système tend vers $+\infty$, les termes en $(J^\alpha)^2$ se comportent comme N^2, alors que les K^α se comportent comme N, ces derniers seront donc négligeables à la limite thermodynamique, et l'on pourra écrire l'Hamiltonien comme :

$$H = -\frac{1}{2J} \{(J^x)^2 + \gamma (J^y)^2\} - \Gamma J^z + O(1)$$

où l'on a posé J = NS qui est aussi la taille du spin total $\underset{\sim}{J} = (J^x, J^y, J^z)$. Dans la limite où N tend vers $+\infty$, on peut traiter le spin $\underset{\sim}{J}$ classiquement, et poser

$$J^x = J \sin\theta \cos\phi$$

$$J^y = J \sin\theta \sin\phi$$

$$J^z = J \cos\theta$$

où θ et ϕ sont les coordonnées sphériques du spin classique.
L'énergie à minimiser est ainsi :

$$E(\theta,\phi) = -\frac{J}{2}(\sin^2\theta \cos^2\phi + \gamma \sin^2\theta \sin^2\phi) - \Gamma J \cos\theta$$

et l'aimantation est donnée par

$$M^2 = \left(\frac{J^x}{J}\right)^2 = \sin^2\theta \cos^2\phi \quad \text{à l'équilibre.}$$

Puisqu'on ne s'intéresse ici qu'au cas où $\gamma < 1$, il vient

$$\frac{\partial E}{\partial \phi} = J(1 - \gamma) \sin^2\theta \sin\phi \cos\phi = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial \theta} = J \sin\theta \left(\Gamma - \cos\theta(1 + (\gamma - 1)\sin^2\phi)\right) = 0$$

Ce couple d'équations possède trois solutions stables et une solution instable. On ne s'intéresse ici qu'aux premières qui sont :

$(\theta = 0, \quad \phi$ quelconque) pour $\Gamma > 1$

$(\cos\theta = \Gamma, \quad \phi = 0)$ pour $\Gamma < 1$

$(\cos\theta = \Gamma, \quad \phi = \pi)$ pour $\Gamma < 1$

Pour ce qui est de l'aimantation, on trouve donc :

$M_\infty = \pm (1 - \Gamma^2)^{1/2}$ pour $\Gamma < 1$

$M_\infty = 0$ pour $\Gamma > 1$

Le système de taille infinie possède donc une transition de phase du second ordre, pour la valeur $\Gamma_c = 1$ du champ transverse, avec un exposant champ moyen $\beta_{CM} = \frac{1}{2}$ pour l'aimantation.

Pour obtenir le gap dans la limite où $N = \infty$, on peut l'identifier (dans un système d'unités où $\hbar = 1$) à la fréquence ω du mouvement du spin $\vec{J}$. Les équations du mouvement sont données par :

$$\frac{dJ^x}{dt} = i\omega J^x = i\,(H,\ J^x) = -\frac{\gamma}{2J}\,(J^yJ^z + J^zJ^y) + \Gamma\,J^y$$

$$\frac{dJ^y}{dt} = i\omega J^y = i\,(H,\ J^y) = \frac{1}{2J}\,(J^xJ^z + J^zJ^x) - \Gamma J^x$$

$$\frac{dJ^z}{dt} = i\ (H,\ J^z) = (1 - \gamma)\ (J^xJ^y + J^yJ^x)$$

A la limite thermodynamique, on a $\frac{dJ^z}{dt} = 2J\,\frac{\partial E}{\partial \phi}$ que l'on peut supposer nul puisque nous nous plaçons au voisinage de l'équilibre. Dans les deux autres équations, on peut alors remplacer J^z par sa valeur champ moyen : J cos θ c'est à dire par J si $\Gamma > 1$ et par $J\Gamma$ si $\Gamma < 1$.
On trouve ainsi pour ω donc pour G_∞ :

$$G_\infty = 0 \qquad \text{pour } \Gamma < 1$$

$$G_\infty = \left((\Gamma - 1)(\Gamma - \gamma)\right)^{1/2} \qquad \text{pour } \Gamma > 1$$

La gap se comporte à la transition comme :

$$G_\infty \sim (\Gamma - \Gamma_c)^{s_{CM}}$$

avec un exposant champ moyen $s_{CM} = \frac{1}{2}$, puisque $\gamma < 1$

. Résultats numériques sur des tailles finies pour des spins 1/2

Dans le cas où les spins individuels sont des spins 1/2, les termes K^α apparaissant dans l'Hamiltonien se réduisent à des constantes, et on peut utiliser de manière exactement equivalente, l'Hamiltonien :

$$H = -\frac{1}{2J}\,\{(J^x)^2 + \gamma(J^y)^2\} - \Gamma\,J^z$$

Ce modèle, pour des tailles finies, a été introduit par Lipkin (Lipkin, Meshkov and Glick, 1965 ; Gilmore and Feng, 1978), pour modéliser un noyau de N nucléons. Quelques calculs ont déja été faits (Lipkin and al., 1965, Newman and Schulman, 1977) mais avec une motivation différente. Comme l'Hamiltonien n'agit que sur un unique spin $\underset{\sim}{J}$ de magnitude $J = \frac{N}{2}$, il est commode d'écrire H sur la base $|J, m>$ où $m = -J, -J+1, \ldots, J$ correspond aux valeurs propres de l'opérateur J^z. De plus, comme J^x et J^y n'interviennent que par leurs carrés, il est facile de voir que l'Hamiltonien connectera un état

$|J, m\rangle$ aux états $|J, m\rangle$, $|J, m+2\rangle$ et $|J, m-2\rangle$. En fait, on s'aperçoit que, pour N pair, l'état fondamental et le premier état excité appartiennent à deux sous-espaces distincts, l'un de dimension $\frac{N}{2}+1$ et l'autre de dimension $\frac{N}{2}$. La recherche des valeurs propres peut ainsi, à cause de la faible taille des matrices mises en jeu, être menée pour des valeurs de N relativement grandes (nous sommes allés jusqu'à la résolution de la taille N = 150 dans ce cas-là, alors que, par comparaison, le même système avec interactions courtes portées ne peut être résolu à l'heure actuelle que pour des tailles n'excédant pas une quinzaine de particules).

Nous reportons ici les résultats (Figure 5) qui ont trait aux tailles N = 10, 20, 60 et 100, pour une valeur $\gamma = 0$ de l'anisotropie (modèle

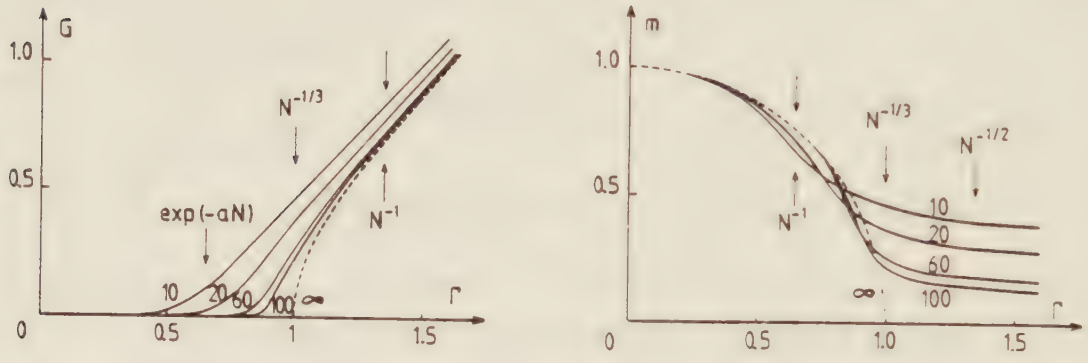

Fig. 5 : Gap et aimantation en fonction du champ transverse pour N fini (les résultats champ moyen sont en pointillés)

purement Ising en champ transverse), étant entendu que nous avons résolu plusieurs autres valeurs de γ comprises en 0 et 1 et que les résultats étaient tout à fait similaires.

L'étude des différences $G - G_\infty$ et $M - M_\infty$ pour le gap et l'aimantation en fonction de N a donné les résultats suivants :

$G \sim \exp(-aN)$; $M - M_\infty \sim N^{-1}$ pour $\Gamma < 1$

$G \sim N^{-1/3}$; $M \sim N^{-1/3}$ pour $\Gamma = 1$

$G - G_\infty \sim N^{-1}$; $M \sim N^{-1/2}$ pour $\Gamma > 1$

Le comportement exponentiel du gap pour $\Gamma < 1$ avait déjà été trouvé analytiquement par Newman et Schulman (1977) mais il n'existe pas, à notre connaissance de preuve analytique de l'exposant 1/3 des lois d'échelle de l'aimantation et du gap à la transition. Cet exposant critique est déterminé ici avec une précision tout à fait convaincante (0.333 ± 0.001). Sur la figure 6 , nous avons tracé Log G et Log M en fonction de Log N pour $\Gamma = 1$, et l'on peut voir, au moins dans le cas où $S = \frac{1}{2}$, étudié ici que le comportement en

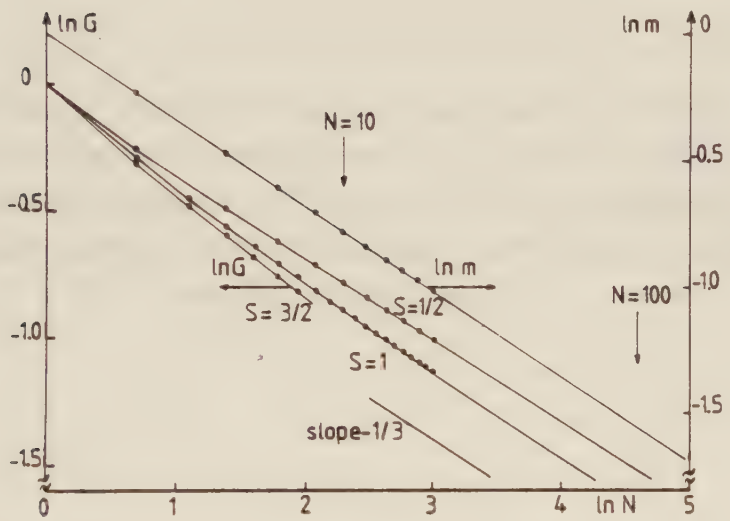

Fig. 6 - Log du gap (ordonnée de gauche) et Log de l'aimantation (ordonnée de droite) en fonction du Log de la taille pour $\Gamma = \Gamma_c$

$N^{-1/3}$ est valable à partir de faibles valeurs de N. De plus, on peut à peu près sûrement exclure le cas où il y aurait des termes logarithmiques (c'est à dire un comportement du type $N^{-1/3}\ \mathrm{Log}^{\alpha}(\frac{N}{N_0})$).

En conclusion de l'étude de ce système, les exposants critiques ω_G et ω_M des lois d'échelle du gap et de l'aimantation avec la taille, à la transition, sont bien consistants avec ce que prévoient les hypothèses H 1 et H 2, que nous n'avons pu tester directement sur cet exemple, à savoir :

$$\omega_G = - \frac{S_{CM}}{\nu_{CM}\, d_c} = - \frac{1}{3}$$

$$\omega_M = - \frac{\beta_{CM}}{\nu_{CM} d_c} = - 1/3$$

où $\beta_{CH} = \frac{1}{2}$, $\beta_{CM} = \frac{1}{2}$, $\nu_{CM} = \frac{1}{2}$ et $d_c = 3$.

Remarquons que l'on aurait pu, tout aussi bien, supposer les conséquences des hypothèses H 1 et H 2, vraies dans ce cas-ci et vérifier (ou trouver) sur cet exemple que $d_c = 3$.
On doit avoir, de plus, $\nu^* = \nu_{CM} d_c = \frac{3}{2}$, exposant de la taille de corrélation du système, et les lois d'échelle suivantes doivent être vérifiées :

$$G \sim | \Gamma - \Gamma_c |^{1/2} \; F_G(N \; | \Gamma - \Gamma_c |^{3/2})$$

$$M \sim | \Gamma - \Gamma_c |^{1/2} \; F_M(N \; | \Gamma - \Gamma_c |^{3/2})$$

où les fonctions F_G et F_M ne dépendent pas de N (au moins asymptotiquement près de la limite thermodynamique). Sur la figure 7 , nous avons tracé $G \; | \Gamma - \Gamma_c |^{-1/2}$ en fonction de $N \; | \Gamma - \Gamma_c |^{3/2}$. Les points, pour des tailles allant de 40 à 100, se mettent bien sur deux courbes, correspondant bien à la forme générale prévue (c. f. Figure 2 , p. 28)

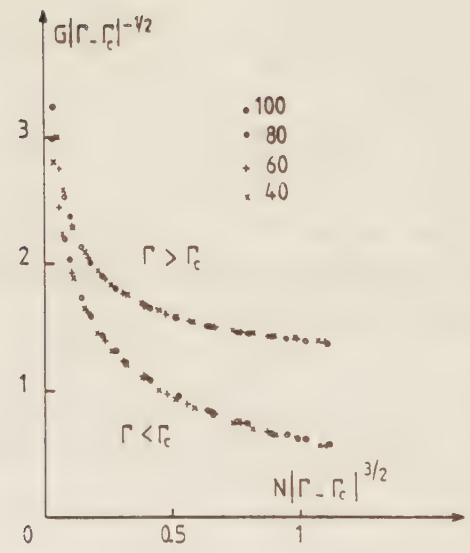

Fig. 7 - Fonction d'échelle pour le gap en fonction de N/N_c

On peut s'intéresser ici au problème plus général d'un système de N particules de spin 1/2 régi par un Hamiltonien du type :

$$H = -\frac{1}{2J}(J^X)^2 - \Gamma J^Z$$

à température T non nulle.

On remarque que le cas traité par Kittel et Shore, c'est à dire $\Gamma = 0$, possède pour l'aimantation, des caractéristiques analogues au cas que nous traitons ici, c'est à dire $T = 0$ et Γ fini. Cela incite à penser que, comme dans le cas des interactions à courtes portées, la transition en champ transverse et la transition en température ont lieu entre une même phase ordonnée et une même phase désordonnée, et que sur un diagramme (T, Γ), on aura une courbe critique représentant les lieux de transition du second ordre entre une phase ordonnée d'Ising et une phase désordonnée de haute température ou de fort champ transverse.

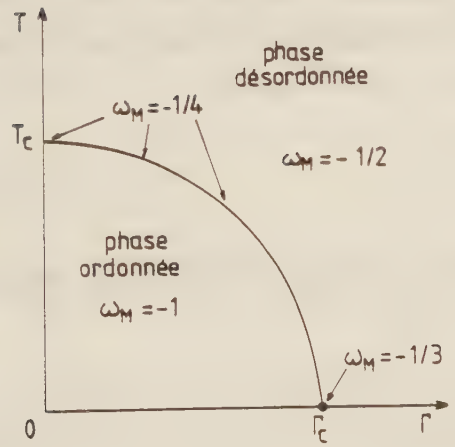

Fig. 8 - Diagramme de phases du modèle d'Ising Co ∞ en champ transverse et en température

De plus, pour toute température non nulle, l'exposant de loi d'échelle avec la taille, de l'aimantation, sera caractéristique des fluctuations thermiques, c'est à dire, $\omega_M = -\frac{1}{4}$ alors que, à température nulle, ce seront les fluctuations quantiques qui seront responsables de la valeur de l'exposant ω_M, soit $-\frac{1}{3}$. Entre les deux, c'est à dire à température finie mais faible, il y aura un changement de régime entre ces deux exposants sur une région qui sera typiquement de l'ordre de grandeur du gap (en unité $1/k_B$). C'est à dire que les fluctuations quantiques seront prépondérantes tant que :

$$G \gtrsim k_B T$$

Comme, d'autre part, le gap suit une loi d'échelle avec la taille du type $G \sim N^{\omega_G}$, avec $\omega_G = -\frac{1}{3}$, la région T^* de changement de régime classique/quantique sera reliéeà la taille du système considéré, par la relation :

$$k_B T^* \sim N^{-1/3}$$

On peut considérer cet argument d'un autre point de vue encore en disant que si l'on se place à température fixe T, et si l'on fait croître la taille du système, il y aura une taille critique N^* qui définira le passage du comportement quantique au comportement classique, et qui sera définie par la relation :

$$N^* \sim (k_B T)^{-3}$$

. Résultats numériques sur des tailles finies pour des spins plus grands que 1/2.

Ce même Hamiltonien (Ising anisotrope avec champ transverse) appliqué à un système de N spins supérieurs à 1/2 est déjà plus compliqué car il

faut tenir compte des termes K^{α} qui ne sont plus des constantes du système. Néanmoins, il est évident que dans la limite thermodynamique, la solution champ moyen ne dépend pas de la grandeur des spins individuels.
Pour savoir si les lois d'échelle avec la taille, dépendent ou non de ce nouveau paramètre, nous avons effectué les mêmes calculs numériques que précédemment avec des spins 1 et des spins 3/2. Pour S = 1, on peut représenter l'Hamiltonien dans la base $|J, \ell, m>$ où, pour J = N (plus grande valeur possible), ℓ et m sont les valeurs propres respectives de K^z et J^z ; pour J donné différent de N, ℓ varie de 0 à N par valeurs entières et pour J et ℓ donnés, m varie de $-\ell$ à $+\ell$ par valeurs entières. La matrice à diagonaliser est d'ordre $(N + 1)(N + 2)/2$. Avec cette représentation, nous avons pu résoudre un système de 70 particules (Figure 6).

Pour S = 3/2, une telle représentation n'est pas possible et nous n'avons mené les calculs que pour $N \sim 8$ (Figure 6).
Au point de vue du comportement asymptotique, l'exposant $\omega_G = -\frac{1}{3}$ paraît vérifié quelle que soit la taille du spin, laissant penser que toutes les conclusions auxquelles nous avions abouti précédemment pour les spins 1/2 sont encore valables (en particulier la dimensionnalité critique supérieure du système à courtes portées correspondant reste $d_c = 3$).
D'autre part, il existe pour les faibles tailles de système un changement de régime dont l'importance est d'autant plus grande que le spin est grand. En particulier pour l'exemple du spin 3/2 où l'on ne connaît que les faibles tailles de système, on reste très certainement à l'intérieur de cette région et l'on ne peut conclure de manière convaincante que $\omega_G = -\frac{1}{3}$ dans ce dernier cas.

. Le modèle X-Y isotrope en champ transverse

Le cas où $\gamma = 1$ dans le modèle précédent est tout à fait particulier à cause des symétries supplémentaires qui y apparaissent.
L'hamiltonien s'écrit maintenant :

$$H = -\frac{1}{NS} \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \Gamma \sum_i S_i^z$$

et l'aimantation, à cause de l'équivalence des directions selon x et selon y doit maintenant s'écrire :

$$M = \frac{1}{(NS)^2} < 0 \mid (\sum_i S_i^x)^2 + (\sum_i S_i^y)^2 \mid 0 >$$

la moyenne étant prise dans l'état fondamental.
Avec les mêmes notations que pour le cas anisotrope précédent, l'énergie dans le cas classique s'écrit :

$$E(\theta, \phi) = -\frac{J}{2} \sin^2\theta - \Gamma J \cos\theta$$

qui ne dépend évidemment plus de ϕ. La minimisation sur θ entraîne les deux solutions stables :

$$\begin{cases} \theta = 0 & \text{si} \quad \Gamma > 1 \\ \cos\theta = \Gamma & \text{si} \quad \Gamma < 1 \end{cases}$$

L'aimantation suit donc une loi similaire au cas anisotrope :

$$\begin{cases} M_\infty = \pm (1 - \Gamma^2)^{1/2} & \text{pour} \quad \Gamma < 1 \\ M_\infty = 0 & \text{pour} \quad \Gamma > 1 \end{cases}$$

d'où, en particulier, $\beta_{CM} = \frac{1}{2}$.

Par contre, le calcul sur l'évolution du spin total, conduit à :

$$G_\infty = 0 \qquad \text{pour} \quad \Gamma < 1$$

$$G_\infty = \Gamma - 1 \qquad \text{pour} \quad \Gamma > 1$$

ce qui donne un exposant $s_{CM} = 1$ pour le comportement critique du gap.

Dans le cas d'un système de spins 1/2, le gap et l'aimantation peuvent être trouvés analytiquement pour toute taille finie N. En effet, l'Hamiltonien

$$H = -\frac{1}{2J} \{(J^x)^2 + (J^y)^2\} - \Gamma J^z$$

est entièrement diagonal dans la représentation $|J, m>$ et les valeurs propres sont :

$$E(J, m) = -\frac{1}{2J}\{J(J+1) - m^2\} - \Gamma m$$

et l'aimantation est donnée par :

$$M^2(J, m) = \frac{1}{J^2}\{J(J+1) - m^2\}$$

L'équation de minimisation de l'énergie, pour trouver l'état fondamental, s'écrit ici : $\frac{m}{J} = \Gamma$, il en résulte que :

- pour $\Gamma > 1$, l'état fondamental est l'état $|J, J>$ et le premier état excité est l'état $|J, J-1>$, il vient donc que le gap : $G=E(J,J-1) - E(J, J)$ et l'aimantation $M^2(J, J)$ sont donnés par

$$G = \Gamma - 1 + \frac{1}{N}$$

$$M = \left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \qquad \text{pour } \Gamma > 1$$

- pour $\Gamma < 1 - \frac{1}{J}$, on montre facilement que le fondamental et le premier état excité sont les deux états $|J, m>$ et $|J, m+1>$,ou $|J, m+1>$ et $|J, m>$ où m désigne la partie entière de $J\Gamma$.

Le gap est donc égal à $\frac{|1 - 2\varepsilon|}{N}$ où $\varepsilon = \frac{N\Gamma}{2} - m$ est la partie décimale de $\frac{N\Gamma}{2}$. Pour Γ fixé inférieur à $1 - \frac{2}{N}$ on a : $G = O(\frac{1}{N})$.

De même l'aimantation s'écrit :

$$M = \left(1 - \Gamma^2 + \frac{1 + 2\Gamma\varepsilon}{J} - \frac{\varepsilon^2}{J^2}\right)^{1/2}$$

soit encore, pour N tendant vers $+\infty$:

$$M = M_\infty + O(\frac{1}{N}) \qquad \text{pour} \quad \Gamma < 1.$$

A la limite thermodynamique, les résultats champ moyen sont retrouvés, et, à la transition (pour $\Gamma = 1$), on a exactement les résultats :

$$\begin{cases} G = \frac{1}{N} \\ \\ M = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \end{cases} \qquad \text{pour } \Gamma = 1$$

qui montre qu'alors, les exposants caractéristiques des effets de taille à la transition du gap et de l'aimantation sont :

$$\omega_G = -1 \quad ; \quad \omega_M = -\frac{1}{2}$$

De plus, si l'on pose :

$$N_c = | \Gamma - 1 |^{-1}$$

on a aussi :

$$G = (\Gamma - 1)(1 + \frac{N_c}{N}) \qquad \text{pour } \Gamma > 1$$

$$M \sim (1 - \Gamma)^{1/2} \, (2 + 2 \frac{N_c}{N})^{1/2} \qquad \text{pour } \Gamma < 1$$

qui montre explicitement les fonctions d'échelle F_G et F_M.
Pour expliquer les valeurs trouvées pour ω_G et ω_M, il faut connaître les trois exposants β_{CM}, s_{CM}, ν_{CM} et la dimensionnalité critique supérieure du système avec interactions à courtes portées correspondant.

Nous avons trouvé $\beta_{CM} = 1/2$ et $s_{CM} = 1$, lors de la résolution du problème du système infini. On peut raisonnablement supposer que $\nu_{CM} = \frac{1}{2}$, comme dans le cas du modèle d'Ising en champ moyen. La valeur de la dimensionnalité critique supérieure est plus délicate à estimer, en effet, le système avec interactions proches voisins correspondant possède un exposant dynamique $z = 2$,(c'est à dire que $G \sim N^{-2}$ à la transition),ce qui suggère que ce système est équivalent à un système classique à d + 2 dimensions. Il en résulte une dimensionnalité d_c égale à 2 pour ce modèle (Gerber and Beck, 1977). On vérifie alors, avec ce jeu de paramètres, que l'on retrouve bien les valeurs de ω_G et ω_N.

. Le modèle d'Ising en champ transverse réel et champ longitudinal imaginaire

La fonction de partition du système d'Ising en champ transverse peut être analytiquement prolongée dans tout le plan complexe de la variable $z = \exp(-2\beta h)$, où h correspond maintenant à un champ magnétique possédant une partie réelle et une partie imaginaire. Yang et Lee (1952) ont montré que les singularités des fonctions thermodynamiques étaient reliées à la répartition des zéros de cette fonction.
Pour un système d'Ising ferromagnétique, ces zéros sont situés sur le cercle unité (donc pour un champ magnétique purement imaginaire) et l'on peut y définir, à la limite thermodynamique, une densité $g(\theta)$ de zéros, où θ est l'angle argument de z (c'est à dire $2i\beta h = \theta$). Si le système possède une transition de phase en température, on a, pour T finie supérieure à T_c, une fonction $g(\theta)$ continue et non nulle sur tout le cercle sauf sur un secteur $2\theta_g$ autour de l'axe des réels positifs. Pour T fixée inférieure à T_c, la fonction $g(\theta)$ est non nulle sur tout le cercle.

En fait, à température finie, on a un comportement critique de la fonction g avec le champ imaginaire, de la forme :

$$g(\theta) \sim (\theta - \theta_g)^{\sigma} \sim (h - h_g)^{\sigma}$$

qui peut être interprété (Fisher, 1978) comme une véritable transition lorsqu'un champ imaginaire pur est appliqué au système.
Fisher a montré de même que cette transition se comporte comme pour une théorie des champs en Φ^3 et la dimensionnalité critique supérieure du système est $d_c = 6$.

De nombreux physiciens se sont penchés sur ce problème (Abe, 1967 ; Baker, 1968 ; Gaunt and Baker, 1970 ; Kortman and Griffiths, 1971 ; Bessis, Drouffe and Moussa, 1976 ; Kurtze and Fisher, 1978 ; Baker and Moussa, 1978 ; Baker, Fisher and Moussa, 1979 ; Barnsley, Bessis and Moussa, 1979). Une manière intéressante d'étudier la singularité de Yang et Lee pour un modèle d'Ising classique à d dimensions est d'étudier son analogue quantique à d - 1 dimensions : le modèle d'Ising en champ transverse réel et champ longitudinal imaginaire pur. Cette démarche a été utilisée par Uzelac (1980) (voir aussi

Uzelac, Pfeuty and Jullien (1979), Uzelac, Jullien and Pfeuty (1980)). L'Hamiltonien à coordinence infinie correspondant s'écrit :

$$H = - \frac{1}{2J} (J^X)^2 - \Gamma J^Z - ih\, J^X$$

pour une assemblée de spins 1/2.

On peut encore définir un spectre physique de cet opérateur en ne considérant que les parties réelles de ses valeurs propres. Nous avons calculé ainsi le gap entre l'état fondamental et le premier état excité et l'aimantation complexe, définie toujours par :

$$M^2 = \frac{1}{J^2} \; < 0 \mid (\sum_i S_i^X)^2 \mid 0 >$$

et c'est la partie réelle de M qui jouera le rôle de paramètre d'ordre du système.

. Résultats champ moyen

On introduit par analogie avec le modèle d'Ising en champ transverse un angle complexe $\theta = \theta' + i\theta''$ et l'on définit les relations :

$$J^X = J \sin \theta \quad ; \; J^Z = J \cos \theta \quad ; \quad M = \sin \theta$$

La fonction de θ à minimiser est alors :

$$E(\theta) = - \frac{J}{2} \sin^2\theta - \Gamma J \cos\theta - ih\, J \sin\theta$$

Le plan (h, Γ) comporte deux régions : la région de la phase désordonnée pour laquelle la seule solution de la minimisation de E est la solution $\theta' = 0$ et la région de la phase ordonnée pour laquelle il existe une solution $\theta' \neq 0$ (le paramètre d'ordre est $M' = \sin\theta' \, ch\, \theta''$ et donc ne peut être nul que si $\theta' = 0$, à π près). La ligne critique qui sépare ces deux régions est donnée par l'équation :

$$\Gamma_c^{2/3} - h_c^{2/3} = 1$$

(fig. 9).

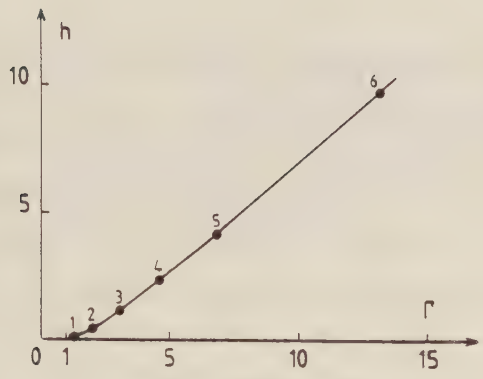

Fig. 9 - Diagramme de phases du modèle d'Ising Co ∞ avec champ transverse réel Γ et champ longitudinal imaginaire pur ih. Les points 1, 2, ... 6, correspondent aux couples (h, Γ) étudiés numériquement.

Au voisinage de $\Gamma_c = 1$ (Ising en champ transverse) on a :

$$h_c \sim (\Gamma_c - 1)^{\Delta}$$

où $\Delta = 3/2$, exposant qui est relié aux exposants β et δ de l'aimantation sans champ complexe, par la relation $\Delta = \beta\,\delta$ (dans le cas du modèle d'Ising, il est connu que $\beta_{CM} = \frac{1}{2}$ et $\delta_{CM} = 3$).

Les comportements critiques du gap G et de l'aimantation (M', M") près de la courbe critique peuvent être facilement trouvés analytiquement. Par exemple, pour h constant, différent de 0, on a :

$$M' \sim (\Gamma_c - \Gamma)^{1/2} \quad ; \quad (M'' - M''_c) \sim \Gamma_c - \Gamma \quad \text{pour} \begin{cases} \Gamma < \Gamma_c \\ \text{proche de } \Gamma_c \end{cases}$$

$$G \sim (\Gamma - \Gamma_c)^{1/4} \quad ; \quad (M'' - M''_c) \sim (\Gamma - \Gamma_c)^{1/2} \quad \text{pour} \begin{cases} \Gamma > \Gamma_c \\ \text{proche de } \Gamma_c \end{cases}$$

La partie réelle de l'aimantation possède l'exposant champ moyen normal 1/2 mais le gap s'ouvre maintenant avec un exposant critique 1/4 différent de l'exposant 1/2 trouvé lorsque h = 0. De plus, la partie imaginaire de l'aimantation possède un exposant champ moyen $\sigma_{CM} = \frac{1}{2}$, pour $\Gamma > \Gamma_c$ (mais égal à 1 pour $\Gamma < \Gamma_c$).

. Résultats numériques

L'Hamiltonien du système est représenté maintenant par une matrice symétrique mais non hermitienne dans la représentation $|J, m\rangle$. Nous gardons la définition usuelle du produit scalaire comme somme des produits des coordonnées respectives. Avec cette définition le carré de la norme peut devenir négatif ou nul sans que le vecteur correspondant soit nul, mais les vecteurs propres de H peuvent encore être orthogonalisés. Les résultats numériques portent sur les quelques valeurs de h notées sur la figure précédente, et on a étudié le gap et l'aimantation comme fonction de Γ pour des tailles N = 10, 20, 60 et 100. (Figure 10)

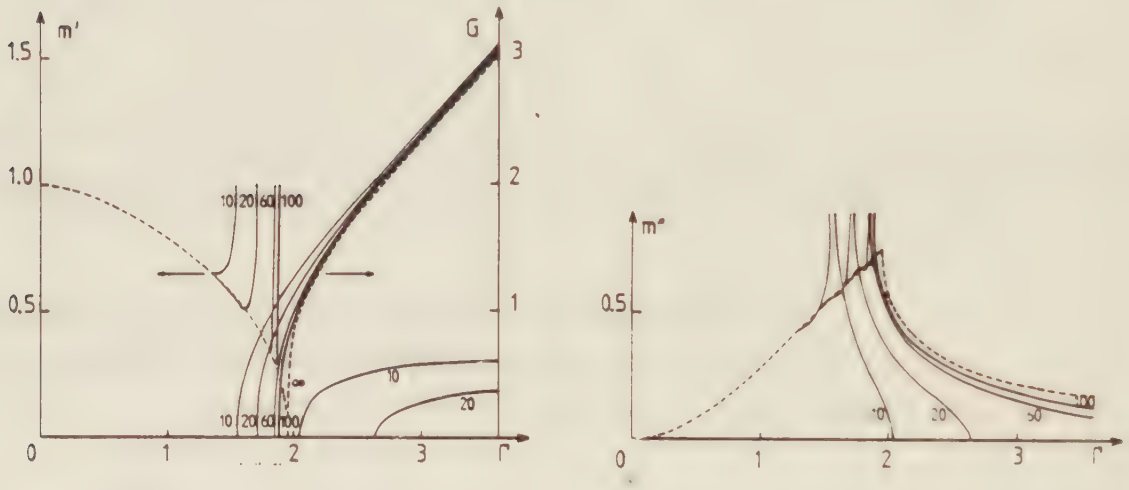

Fig. 10 - Partie réelle m' de l'aimantation et gap (à gauche), partie imaginaire m" de l'aimantation (à droite) en fonction de Γ, en $h=h_c$, pour des tailles finies (les résultats champ moyen sont en pointillés).

On observe qu'il y a une singularité pour N fini, pour une valeur $\Gamma_c(N)$ qui tend, pour $N \to \infty$ vers la valeur champ moyen Γ_c. Comme dans le cas de la vraie transition de phase (pour $N = \infty$), cette singularité correspond à une ouverture du gap pour $\Gamma > \Gamma_c(N)$ et sépare le plan en une région où $m' \neq 0$ ($\Gamma < \Gamma_c(N)$) et une région où $m' = 0$ ($\Gamma > \Gamma_c(N)$). (On peut remarquer de plus que m' s'annule à nouveau pour une valeur $\Gamma^*(N)$ plus grande que $\Gamma_c(N)$, et qui tend vers $+\infty$ très vite lorsque N croît ; cette valeur $\Gamma^*(N)$ n'est pas une vraie valeur critique et ne correspond qu'à l'annulation de M^2, qui devient positive pour $\Gamma > \Gamma^*(N)$).

La singularité à $\Gamma_c(N)$ possède des exposants critiques champ moyen triviaux pour N fini, représentant seulement l'annulation de la norme euclidienne (d'où les exposants 1/2 pour l'aimantation) du vecteur propre associé à l'état fondamental :

$$M'' \sim M' \sim (\Gamma_c(N) - \Gamma)^{-1/2} \qquad \text{pour } \Gamma < \Gamma_c(N)$$

$$M'' \sim (\Gamma - \Gamma_c(N))^{1/2} \; ; \; G \sim (\Gamma - \Gamma_c(N))^{1/2} \qquad \text{pour } \Gamma > \Gamma_c(N)$$

quand $N \to \infty$, la valeur de $\Gamma_c(N)$ tend vers sa valeur champ moyen Γ_c et les exposants caractéristiques tendent vers leurs valeurs critiques. Il y a alors un changement de régime important pour l'aimantation dont l'exposant passe de la valeur - 1/2 pour N fini, à la valeur + 1/2 pour N infini, et pour le gap dont l'exposant passe de même de la valeur 1/2 à la valeur 1/4, si h n'est pas nul.

Sur les figures suivantes (Figure 11), nous avons tracé Log G et Log $|M''_\infty - M''_\infty|$ en fonction de Log N. Si l'on oublie les accidents de M"

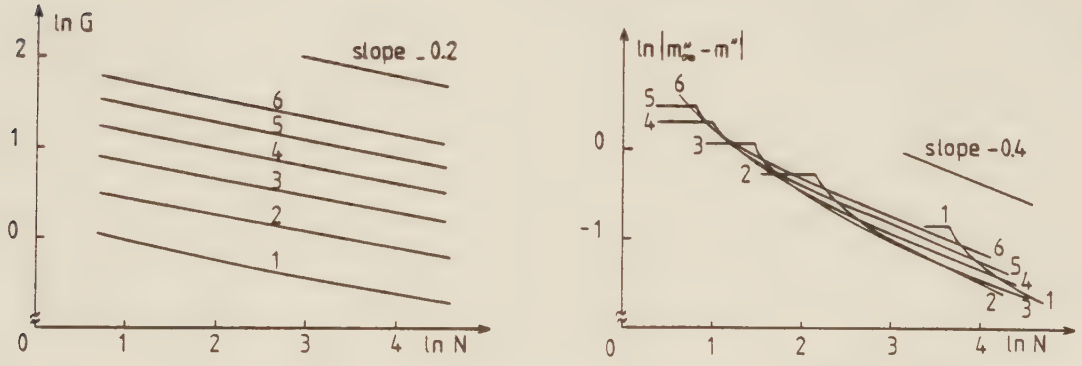

Fig. 11 - Log du gap (à gauche) et Log de $|m''_\infty - m''|$ (à droite) en fonction du Log de la taille aux points critiques indiqués sur la figure 9.

pour $\Gamma > \Gamma^*(N)$, on trouve, lorsque N est grand :

$$G \sim N^{\omega_G} \qquad ; \qquad |M''_\infty - M''| \sim N^{\omega_M}$$

avec :

$$\omega_G = 0.2 \quad \text{et} \quad \omega_M = 0.4.$$

Il reste à vérifier si ces valeurs sont en accord avec ce que prévoit la théorie, à savoir $\omega_G = \frac{s_{CM}}{\nu_{CM}\, d_c}$ et $\omega_N = \frac{\sigma_{CM}}{\nu_{CM}\, d_c}$.

Dans le cas du problème de Yang et Lee, on a :

$$s_{CM} = 1/4$$

$$\sigma_{CM} = 1/2$$

$$\nu_{CM} = 1/4 \qquad \text{(Fisher, 1978)}$$

et la dimensionnalité critique supérieure est $d_c = 6 - 1 = 5$, ce que vérifient bien les valeurs trouvées.

C O N C L U S I O N

Rien n'est jamais perdu
tant qu'il reste quelque chose à trouver.

Pierre Dac.

Cette thèse développe une théorie (la description des phénomènes critiques au voisinage de la transition par des lois d'échelle avec la taille) et une de ses ramifications (l'étude des systèmes à coordinence infinie).

Du point de vue des applications possibles, il faut séparer ces deux aspects :

. La théorie.

Le passage des lois d'échelle avec la dimension d'un système aux lois d'échelle avec sa taille est très similaire au passage de la physique du milieu continu (grandeur extensive fondamentale : la longueur) à la physique du milieu discontinu (grandeur extensive fondamentale : nombre de particules). Dans une théorie hydrodynamique d'un milieu qui développe une transition de phase, la longueur de corrélation représente la dimension moyenne des germes d'une des phases dans l'autre. Comme on ne s'intéresse ici qu'aux transitions du second ordre, les deux phases ne peuvent coexister et les germes n'ont qu'une durée de vie limitée (ils se font et se défont continuellement). Le point de vue discontinu est plus réaliste dans de nombreux problèmes : il remplace la notion de longueur de corrélation par celle de taille de corrélation qui représente maintenant la taille moyenne de l'amas auquel est liée (dans le sens : corrélée)une particule donnée.
Un exemple simple est la structure hiérarchique de l'Univers qui s'ordonne selon des super-amas de galaxies, qui sont des amas d'amas de galaxies, ces derniers étant des amas de galaxies qui sont elles-mêmes des amas d'étoiles qui sont des amas de gaz formé d'amas de particules... A chaque échelle (de longueur, de temps, ...) correspond une particule de base bien définie (amas de galaxies, galaxie, étoile, molécule, nucléon) et l'ensemble de ces particules

se distribue de manière inhomogène, faisant apparaître des tailles caractéristiques souvent bien mieux définies que les longueurs (ceci dû au fait que l'on a plus facilement accès aux masses à cause de la forme de l'interaction gravitationnelle qu'aux dimensions propres).
Un second point est que la théorie des lois d'échelle avec la taille est valable pour des systèmes dont la physique est champ moyen ce qui permet d'étudier des modèles qui ont tout de même une certaine importance en physique et qui jusqu'à présent, échappaient aux lois d'échelle. Enfin, l'extension à des systèmes qui développent une transition de phase du premier ordre reste à faire dans tous les cas et devrait permettre une approche tout à fait nouvelle.

. Les systèmes à coordinence infinie.

Ici encore, il y a deux aspects bien distincts : tout d'abord un système Co ∞ peut apparaître comme modèle d'un système physique. L'exemple historique est le gaz chaud et dense (Van der Waals), mais il y a en physique nucléaire le modèle de Lipkin et, en tout domaine de la physique, la modélisation des systèmes champ moyen.
Le second aspect est que, d'après ce que nous avons développé, l'étude des systèmes à coordinence infinie permet d'avoir accès à la dimensionnalité critique supérieure du système avec interactions courtes portées correspondant, et il peut être très utile de savoir si, par exemple pour une dimensionnalité égale à 3, un système est champ moyen ou non. Ainsi l'étude des lois d'échelle avec la taille du modèle de Sherrington et Kirkpatrick (travail ébauché par Bray et Moore (1979)) devrait permettre de préciser la dimensionnalité critique supérieure du modèle d'Ising avec interactions aléatoires entre proches voisins, système qui semble physiquement important.

Pour terminer, je dirai quelques mots sur le point de départ de cette thèse : étude des systèmes magnétiques avec interactions à longue portée en $1/r^p$. C'est un point que nous avons laissé complètement de côté pour étudier le cas particulier où p = 0, mais il y a certainement, dans le même ordre d'idées, des études très fructueuses à faire pour des valeurs de p quelconques. Le cas typique est le modèle d'Ising, à température nulle, avec champ transverse Γ et interactions ferromagnétiques en $1/r^p$. Pour p = 0, la transition en Γ est du type champ moyen, ce qui n'est pas le cas pour p = ∞ (Pfeuty,

1970). Il y aura donc une valeur de p qui délimite la physique champ moyen de celle qui ne l'est pas. Quelle est cette valeur de p et comment évoluent les lois d'échelle lorsqu'on fait varier ce paramètre ? Ce genre de questions est important car après tout, les interactions de contact (c'est-à-dire entre proches voisins) ne sont guère qu'une approximation comme une autre et les interactions que l'on trouve réellement dans la nature sont tout à fait différentes. Un seul exemple suffira :lorsqu'on parle d'une énergie du type $J \vec{S}_i \vec{S}_j$, il s'agit en fait d'une interaction dipolaire alors n'oublions pas que J doit être en $1/r^3$ (sans parler du terme en $(\vec{S}_i \vec{u})(\vec{S}_j \vec{u})$). Une application numérique simple montre que l'approximation des plus proches voisins est valable si $\rho >> \frac{1.6\ T}{S^2}$ où ρ désigne la concentration des moments magnétiques en nombre par $\mathring{A}^3$, T est la température en K et S est la valeur moyenne de la grandeur d'un spin . Au-dessous de 100 mK, l'approximation des interactions entre proches voisins n'est valable que pour des milieux magnétiques dilués et si ce n'est pas le cas, il faut tenir compte d'une interaction en $1/r^3$, ce qui risque de modifier complètement la physique du système.

Nous avons fabriqué des outils, il faut maintenant les utiliser....

APPENDICE A

Le but du calcul que nous allons développer ici, est de montrer la propriété suivante :

Si $f(\eta)$ est une fonction analytique pour $|\eta| < a$, a étant un réel strictement positif (ou $+\infty$) telle que :

. f soit croissante sur $(0, a)$

. $f(\eta) \sim \eta^k$ au voisinage de 0, k étant un entier strictement positif, alors :

$\int_0^a e^{-Nf(\eta)}\, d\eta$ est une fonction analytique de la variable $\frac{1}{N^{1/k}}$ à des termes $O\left(\frac{e^{-Nf(a)}}{Nf(a)}\right)$ près.

La démonstration est facile une fois effectué le changement de variable : $\tau = f(\eta)$, en effet, si f s'écrit :

$$f(\eta) = \sum_{i \geq k} a_i \eta^i \qquad \text{où} \qquad a_i \neq 0 \quad ,$$

il est clair que l'expression $\frac{1}{f'(f^{-1}(\tau))}$ sera développable en série entière de $\tau^{1/k}$, et, plus précisément :

$$\frac{1}{f'(f^{-1}(\tau))} = \frac{1}{k a_k} \left(\frac{\tau}{a_k}\right)^{\frac{1-k}{k}} \Phi\left(\left(\frac{\tau}{a_k}\right)^{1/k}\right)$$

où Φ est une fonction analytique, qui se développe au voisinage de 0 selon:

$$\Phi(x) = 1 - 2\frac{a_{k+1}}{k a_k} x + \frac{13-k}{2k^2}\frac{a_k^2+1}{a_k^2} - \frac{3a_{k+2}}{k a_k} x^2 + \ldots = \sum_{j \geq 0} \alpha_j x^j$$

L'intégrale proposée peut alors s'écrire, en fonction des α_j :

$$\int_0^a e^{-Nf(\eta)}\, d\eta = \sum_{j\geq 0} \alpha_j \int_0^{Nf(a)} e^{-u}\, u^{\frac{j+1}{k}-1}\, du \,\frac{1}{(a_k N)^{\frac{j+1}{k}}}$$

Connaissant d'autre part le développement en série entière de l'intégrale eulérienne incomplète, il vient :

$$\int_0^n e^{-Nf(\eta)}\, d\eta = \sum_{j\geq 0} \alpha_j\, \Gamma\left(\frac{j+1}{k}\right) \frac{1}{(a_k N)^{\frac{j+1}{k}}} - \frac{e^{-Nf(a)}}{Nf(a)} \sum_{j\geq 0} \alpha_j \left(\frac{f(a)}{a_k}\right)^{\frac{j+1}{k}} \Gamma\left(\frac{j+1}{k}\right)$$

$$\times \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{j+1}{k} - r\right)\left(Nf(a)\right)^r}$$

ce qui finit la démonstration.

Le calcul explicite des premiers termes de la suite (α_j) donne :

$$\alpha_0 = \frac{1}{k}$$

$$\alpha_1 = -\frac{2}{k^2} \cdot \frac{a_{k+1}}{a_k}$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{k^2}\left(\frac{13 - k}{2k} \frac{a^2_{k+1}}{a^2_k} - \frac{3a_{k+2}}{a_k}\right)$$

Remarque : les conclusions auraient été similaires pour une intégrale de la forme :

$$\int_0^a g(\eta)\, e^{-Nf(\eta)}\, d\eta \quad \text{où} \quad g(\eta) \text{ est une fonction analytique de } \eta,$$

cela complique seulement les expressions des coefficients α_i.

Conséquences :

. Physiquement, les cas intéressants sont ceux pour lesquels :

$$f(\eta) = a_{2k}\,\eta^{2k} + a_{2k+2}\,\eta^{2k+2} + \ldots.$$

$$f(a) = +\infty$$

(ce sont par exemple les densités d'énergie libre des modèles Berlin et Kac, Ising, Heisenberg,... Co ∞)
Pour cette forme, nous avons au moins deux résultats intéressants :

- pour aucun exposant k entier non nul, il n'apparaît de termes logarithmiques en N dans une expression de la forme $\int_o^a g(\eta)\, e^{-Nf(\eta)}\, d\eta$ puisque celle-ci est une fonction analytique de $N^{-1/2k}$

- pour N tendant vers $+\infty$, on a, numériquement :

$$\int_o^a e^{-Nf(\eta)} d\eta = \frac{1}{2k}\,\Gamma\left(\frac{1}{2k}\right)\frac{1}{(a_{2k}N)^{1/2k}} - \frac{3a_{2k+2}}{4k^2\,a_{2k}}\,\Gamma\left(\frac{3}{2k}\right)\frac{1}{(a_{2k}N)^{3/2k}} + O\left(\frac{1}{N^{2/k}}\right)$$

expression qui permet de retrouver le comportement en $\frac{1}{N^{1/2}}$ pour une fonctionnelle de la forme $f(\eta) = a_2\,\eta^2 + a_4\eta^4 + \ldots$ et en $\frac{1}{N^{1/4}}$ pour $f(\eta) = a_4\eta^4 + a_6\eta^6 + \ldots.$ avec la propriété supplémentaire que l'on passe d'un cas à l'autre mathématiquement par une discontinuité (la limite des expressions pour a_{2k} tendant vers 0 n'est pas définie) et physiquement par une transition de phase. (Rigoureusement, la démonstration telle que nous l'avons présentée, n'est valable que pour f croissante sur $[0, a[$, mais elle s'étend sans difficulté pour des fonctions analytiques dont le sens de variation est quelconque, il suffit de partager l'intervalle de départ en un nombre fini d'intervalles sur lesquels la fonction est monotone, ce qui implique que la conséquence précédente est valable non seulement pour $T > T_c$ mais aussi pour $T < T_c$).

APPENDICE B

Il s'agit ici de trouver une formule asymptotique de :

$$G(th^n)(m, \alpha) = 2\int_{R_+} z^m \, th^n(\alpha z) \, e^{-\frac{z^2}{2}} \, dz$$

lorsque α tend vers $+\infty$.

On considère dans la suite plus généralement une fonction ϕ définie sur R_+ et développable en série entière de e^{-z}, c'est à dire

$$\phi(z) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \, e^{-sz}$$

et un nombre réel positif α qui sera toujours supposé grand.
Définissons alors la transformée $G(\Phi)$ de la fonction ϕ par rapport à la mesure $z^m \, e^{-\frac{z^2}{2}}$:

$$G(\Phi)\,(m, \alpha) = 2\int_{R+} z^m \, \Phi(\alpha z) \, e^{-\frac{z^2}{2}} \, dz$$

qui s'écrit aussi sous la forme :

$$G(\Phi)(m,\alpha) = 2^{\frac{m+1}{2}} \sum_{s=0}^{\infty} a_s e^{\frac{s^2\alpha^2}{2}} \int_{\frac{s^2\alpha^2}{2}}^{+\infty} u^{-1/2}(u^{1/2} - \frac{s\alpha}{2^{1/2}})^m \, e^{-u} \, du$$

Sauf pour le terme a_0, qui est maintenant multiplié par $2^{\frac{m+1}{2}} \, \Gamma(\frac{m+1}{2})$, les termes a_s, où $s > 1$, sont multipliés par la somme de m intégrales eulériennes incomplètes.
Si l'on pose

$$K(m, r) = 2^r \sum_{k=0}^{m} C_m^k \, (-1)^k \, \frac{\Gamma(\frac{k+1}{2})}{\Gamma(\frac{k+1}{2} - r)}$$

et

$$\Phi_{(n)}(z) = a_0\delta(n) + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{a_s}{s^n} \, e^{-sz}$$

où n est un entier positif, on a pour $G(\Phi)$ l'expression

$$G(\Phi)(m,\alpha) = a_0 2^{\frac{m+1}{2}} \Gamma(\tfrac{m+1}{2}) + 2(-1)^m \sum_{r=0}^{\infty} \frac{K(m,r)\ \Phi_{(2r-m+1)}(o)}{\alpha^{2r-m+1}}$$

On a heureusement quelques précisions sur les fonctions K et $\Phi_{(n)}$:

. sur K(m,r) :

on a la formule

$$K(m,r) = \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\left(\ldots \frac{1}{x}\frac{d}{dx}\left(\frac{(1-x)^m}{x}\right)\right)\right)_{x=1}$$ où l'on fait r dérivations.

on en déduit après quelques calculs fastidieux que :

$$K(m, r) = 0 \qquad \text{si } r < m$$

$$K(m, m) = (-1)^m\, m!$$

$$K(m, m+1) = (-1)^{m+1}\,(m+1)!\,(1 + \tfrac{m}{2})$$

il faut remarquer que cela entraîne immédiatement que $G(\Phi)(m,\alpha) - a_0 2^{\frac{m+1}{2}} \Gamma(\frac{m+1}{2})$ est un infiniment petit d'ordre $\frac{1}{\alpha^{m+1}}$.

. sur $\Phi_{(n)}(0)$:

La fonction $\Phi_{(n)}(z)$ est évidemment reliée à la n-ième primitive de $\Phi(z)$, toutes les primitives jusqu'à la n-ième étant nulles à l'infini. Le calcul de $\Phi_{(n)}(o)$ est ainsi en général très simple, pour de petites valeurs de n.
Une propriété utile de la suite $(\Phi_{(n)}(o))$ qui se montre aisément par récurrence est que, s'il existe un indice n_o pour lequel l'inéquation différentielle :

$\Phi'_{(n_o)}(z) + \Phi_{(n_o)}(z) > 0$, (resp < 0), pour tout z réel positif, a lieu, sauf peut-être en un nombre fini de points, alors la suite $(\Phi_{(n)}(o))_{n>n_o}$ est strictement monotone et de signe constant.

Au voisinage de $+\infty$, la fonction $G(\Phi)$ s'écrit donc :

$$G(\Phi)(m,\alpha) = a_o 2^{\frac{m+1}{2}} \Gamma(\tfrac{m+1}{2}) + \frac{2m!\,\Phi_{(m+1)}(o)}{\alpha^{m+1}} - \frac{(m+2)(m+1)!\,\Phi_{(m+3)}(o)}{\alpha^{m+3}} + O(\frac{1}{\alpha^{m+5}})$$

Exemple d'applications

Si $\Phi_{(o)}(z) = th^2(z) = (1 - 2e^{-2z} + 2e^{-4z} - 2e^{-6z} + ...)^2$

Cette fonction est évidemment une fonction entière de e^{-z} pour z positif. D'autre part, on a :

$$\Phi_{(1)}(z) = \int_z^\infty (th^2(x) - 1)dx = th(z) - 1 \qquad (\Phi_{(1)}(o) = -1)$$

$$\Phi_{(2)}(z) = \int_z^\infty (th(x) - 1)dx = z - Log\,(2chz) \qquad (\Phi_{(2)}(o) = -Log\,2)$$

et en particulier, puisque

$\Phi'_{(1)}(z) + \Phi_{(1)}(z) = th(z)\,(1 - th(z)\,) > 0$ pour tout j réel strictement

positif, (ce qui n'est pas le cas pour $\Phi_{(o)} - 1$), la suite $(\Phi_{(n)}(o)\,)_{n>1}$ sera strictement croissante et négative (donc, en particulier aucune valeur de cette suite n'est nulle).

$$\int_R th^2(\alpha z)\, e^{-z^2/2}\, dz = (2\pi)^{1/2} - \frac{2}{\alpha} + O(\frac{1}{\alpha^3})$$

$$2\int_{R_+} z\, th^2(\alpha z) e^{-z^2/2}\, dz = 2 - \frac{2Log\,2}{\alpha^2} + O(\frac{1}{\alpha^4})$$

R E F E R E N C E S

And thick and fast
They came at last,
And more and more and more

Lewis Carroll

Abe R. (1967) Prog. Theor. Phys. 38, 72
Baker G. A. (1968), Phys. Rev. Lett. 20, 990
Baker G. A., Fisher M. E. and Moussa P. (1979), Phys. Rev. Lett. 42, 615
Baker G. A. and Moussa P. (1978), J. Appl. Phys. 49, 1360
Barber M. N. and Fisher M. E. (1973), Ann. Phys. 77, 1
Barnsley M., Bessis D. and Moussa P. (1979), J. Math. Phys. 20, 535
Barouch E. and Mac Coy B. (1971), Phys. Rev. A 3, 786
Berlin T. H. and Kac M. (1952) Phys. Rev. 86, 821
Bessis J. D., Drouffe J. M. and Moussa P. (1976), J. phys. A 15, 2105
Botet R. and Jullien R. (1982 a) J. Phys. A 15, 2621
Botet R. and Jullien R. (1982 b) Submitted to Phys. Rev.
Botet R. and Jullien R. (1982 c), Phys. Rev. B, Rapid Comm. (à paraître Déc. 82)
Botet R. , Jullien R. and Pfeuty P. (1982), Phys. Rev. Lett. 49, 478
Bray A. J. and Moore M. A., (1979), J. Phys. C 12, L 441
Brézin E., (1982), J. Physique 43, 15
Curie P. (1895), Ann. Chim. Phys. 5, 289
Dacol D. K. (1980), Physica 100 A, 496
Dekeyser R. and Lee M. H. (1979), Phys. Rev. B 19, 265
Dekeyser R. and Stella A. (1980), J. Stat. Phys. 23, 587
Edwards S. F. and Anderson P. W. (1975), J. Phys. F 5, 965
Falk H. (1972), Phys. Rev. B 5, 3638
Ferdinand A. E. (1967), Thèse, University of London
Ferdinand A. E. and Fisher M. E. (1969), Phys. Rev. 285, 832
Fisher M. E. (1974), Rev. Mod. Phys. 46, 597
Fisher M. E. (1978), Phys. Rev. Lett. 40, 1610
Fisher M. E. and Barber M. N. (1972), Phys. Rev. Lett. 28, 1516
Gaunt D. S. and Baker G. A. (1970) Phys. Rev. B 1, 1184
Gerber P. R. and Beck H. (1977) J. Phys. C 10, 4013
Gilmore R. and Feng D. H. (1978), Phys. Lett. B 76, 26
Haldane F. D. M. (1981) I. L. L. Preprint n° SP-81/95
Haldane F. D. M. (1982), Bull. Am. Phys. Soc. 27, 181
Hamer C. J. and Barber M. N. (1980), J. Phys. A. 13, L 169
Hamer C. J. and Barber M. N. (1981) J. Phys. A 14, 241
Imry Y. and Ma S. K. (1975), Phys. Rev. Lett. 35, 1399
Ising E. (1925), Z. Phys. 31, 253
Joyce G. S. (1974) dans "Phases Transitions and Critical Phenomena", Domb and Green, 2, 375
Jullien R. and Pfeuty P., (1981) J. Phys. A 14, 3111
Jullien R., Pfeuty P., Fields, J. N. and Doniach S. (1978) Phys. Rev. B 18, 3568

Kaufman B., (1949), Phys. Rev. 76, 1232

Kim J. M. and Lee M. H. (1981), Phys. Rev. B 24, 3961

Kittel C. and Shore H. (1965), Phys. Rev. 138, A 1165

Kogut J. (1979), Rev. Mod. Phys. 51, 659

Kortman J. P. and Griffiths R. B. (1971), Phys. Rev. Lett. 27, 1439

Kurtze D. A. and Fisher M. E. (1979) Phys. Rev. B 20, 2785

Lee M. H. (1982), J. Math. Phys. 23, 464

Lipkin H. J. Meshkov N and Glick A. J. (1965) Nuclear Physics 62, 188

Newman C. M. and Schulman L. S. (1977), J. Math. Phys_ 18, 23

Niemeijer T. (1970), Physica 48, 467

Nightingale M. P. (1976) Physica 83A, 561

Nightingale M. P. (1977), Phys. Lett. 59A, 486

Nijboer B. R. A. and De Wette F. W. (1957) Physica 23, 309

Onsager L. (1944), Phys. Rev. 65, 117

Penson K. A., Jullien R. and Pfeuty P., Phys. Rev. B 19, 4653

Pfeuty P. (1970), Ann. Phys. 57, 79

Pfeuty P. and Elliott R. J. (1971), J. Phys. C 4, 2370

Schneider T. and Pytte E. (1977), Phys. Rev. B 15, 1519

Sherrington D. and Kirkpatrick S. (1975), Phys. Rev. Lett. 35, 1792

Sneddon L. (1978), J. Phys. C 11, 2823

Sneddon L. (1979), J. Phys. C 12, 3051

Sneddon L. and Stinchcombe (1979) J. Phys. C 12, 3761

Stanley H. E. (1968) Phys. Rev. 176, 718

Stella A. and Dekeyser R. (1981), J. Stat. Phys. 25, 443

Uzelac K. (1980), Thèse, Université de Paris-Sud

Uzelac K., Jullien R. and Pfeuty P. (1980), Phys. Rev. B 22, 436

Uzelac K., Pfeuty P. and Jullien R. (1979), Phys. Rev. Lett. 43, 805

Vertogen G. and De Vries A. S. (1972), Physica 59, 634

Whitehead P. R. (1980) dans "Theory and Applications of Moment Methods in Many Fermions Systems", J. B. Dalton, S. M. Grime, J. P. Vary and S. A. Williams.

Whitehead P. R. and Watt A. J. (1978), J. Phys. G 4, 835.

RESUME -

Cette thèse est une étude théorique du comportement avec la taille de systèmes statistiques à nombre fini d'éléments, lorsque chaque élément interagit également avec tous les autres. Pour ces systèmes à "coordinence infinie", l'approximation du champ moyen est valable lorsqu'une transition de phase du second ordre se développe à la limite thermodynamique. Les lois d'échelle de Fisher et Barber sont reformulées pour pouvoir s'appliquer à ces systèmes. Un argument permet de déterminer les exposants caractéristiques de la variation des grandeurs thermodynamiques avec la taille du système, à la température de transition. Ces exposants sont reliés à la dimensionnalité critique supérieure du système à interactions courtes portées correspondant. L'argument est testé par des calculs analytiques et numériques sur divers modèles de dimensionnalités critiques supérieures différentes.

Mots clés

Transitions de phase, champ moyen, lois d'échelle, dimensionnalité critique supérieure.